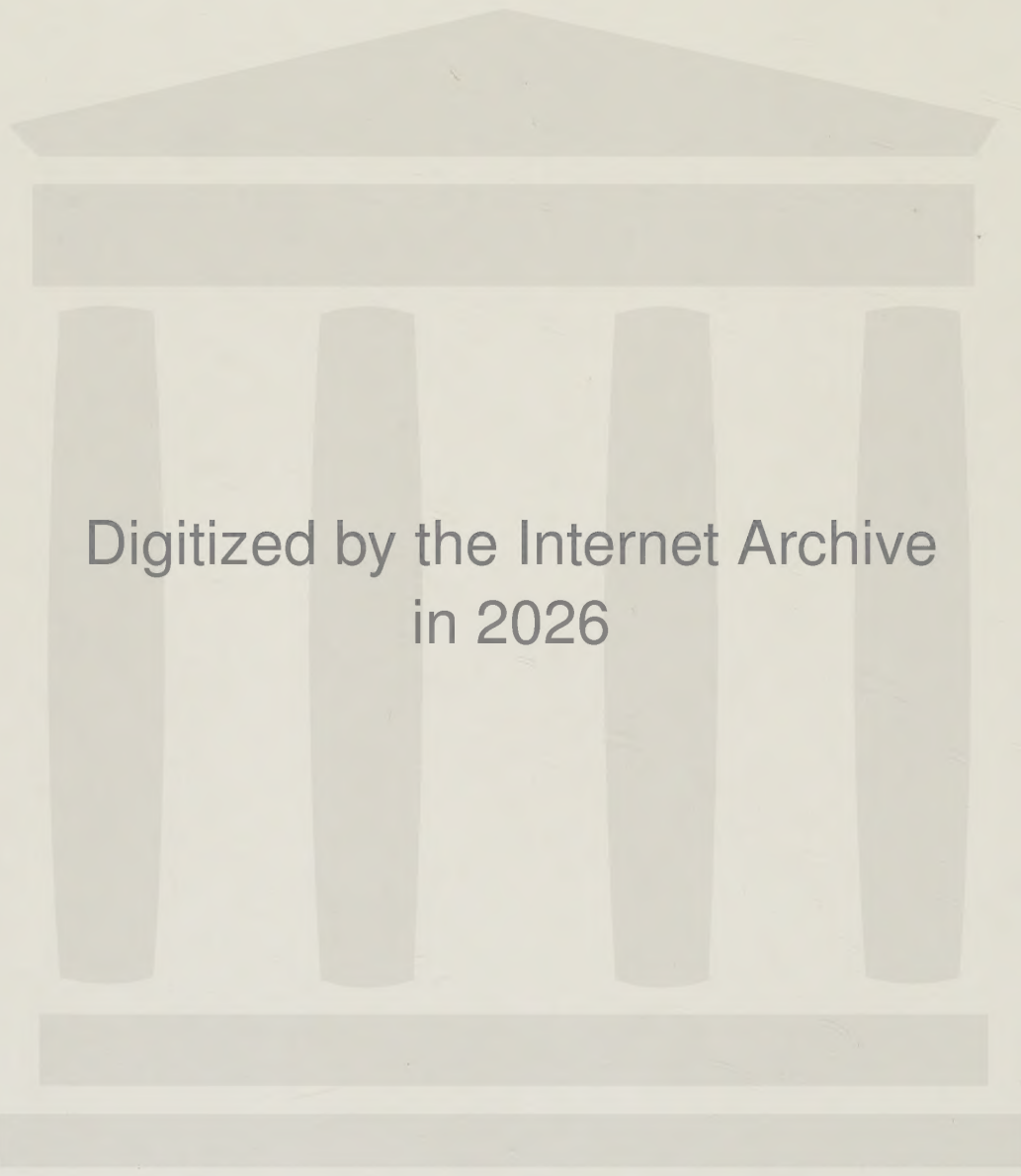


Y. Kirsch

Frankfurt a. 1980



Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41550820_0028

ZUR QUASIMOLEKULAREN LOCHERZEUGUNG UND
RÖNTGENSTRAHLUNG IN DER NÄHERUNG
UNABHÄNGIGER TEILCHEN

Inaugural - Dissertation

zur

Erlangung des Doktorgrades der Naturwissenschaften
vorgelegt beim Fachbereich Physik der
Johann Wolfgang Goethe-Universität
zu Frankfurt am Main

von

Johannes Kirsch
aus Frankfurt am Main

Frankfurt am Main

1980



Gedruckt mit Genehmigung des Fachbereichs Physik
der Johann Wolfgang Goethe-Universität zu
Frankfurt am Main

Dekan :	Prof. Dr. W. Martienssen
Leiter der Arbeit :	Prof. Dr. W. Greiner
Erstgutachter :	Prof. Dr. W. Greiner
Zweitgutachter :	Prof. Dr. B. Müller

Tag der mündlichen Prüfung : 3. März 1980

Abstract

The ionization probability of the K - shell in collisions of very heavy ions and the quasimolecular orbital K - X-rays are investigated. The aim is to extract information from the observed K - holes and photon spectra about the large electron binding energies being on the order of the electron rest mass for heavy systems.

A unified formulation of the interaction of electrons with the electromagnetic field based on quantized interacting fields is presented. This reduces the effort in treating many-particle systems substantially as compared with the usual S - matrix theory.

To calculate the cross-sections the following assumptions are made: the semiclassical approximation, the use of the adiabatic basis and the independent particle approximation. The numerical results for the Pb + Pb - system and the Pb + Cm - system are compared with recent experimental data.

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung

2. MO - Spektroskopie: Beschreibung mit Konfigurationen

2.1 Theorie

2.2 Das Pb + Pb - System

2.3 Zur Anwendbarkeit der Standardbeschreibung

3. Quantenfeldtheoretischer Formalismus

3.1 Lagrangedichte und Feldgleichung

3.2 Lösung der Gleichung für das Elektronenfeld

3.3 Locherzeugungsraten

3.4 Das Strahlungsfeld

3.5 Die Strahlungsintensität

3.6 Ein schematisches Modell

4. Strahlungsquerschnitt und Anisotropie im Schwerionenstoß

4.1 Systemtransformationen

4.2 Multipolentwicklung

4.3 Zweizentrenwellenfunktionen

4.4 Strahlungsmatrixelemente

4.5 Zur Berechnung der Querschnitte

5. Multipoleffekte in der Locherzeugung

5.1 Die K - Ionisation als Nachweis des Eintauchprozesses

5.2 Die adiabatische Basis und ihre Diabatisierung

5.3 Numerische Resultate

5.4 Diskussion der Fehlerquellen

6. Die Pb + Pb - Röntgenstrahlung

6.1 Der Grenzfall langer Wellenlängen

6.2 Zur Behandlung der Zeitintegrale

6.3 Strahlungsspektrum und Anisotropie des Pb + Pb - Systems

7. Zusammenfassung und Ausblick

Anhang

Literaturverzeichnis

Lebenslauf

1. Einleitung

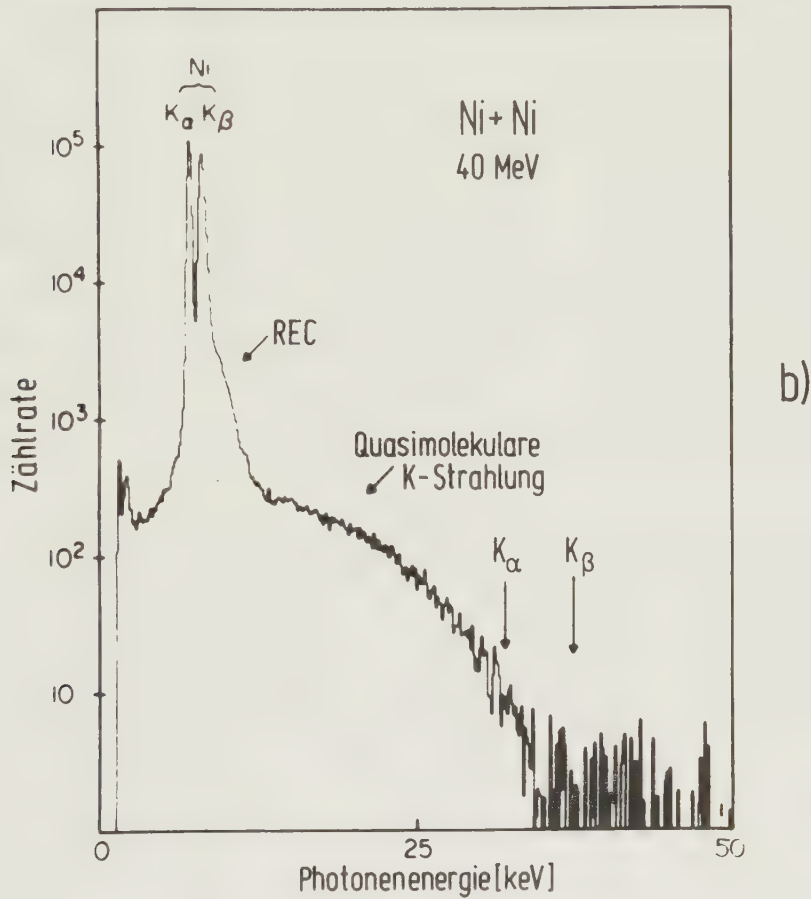
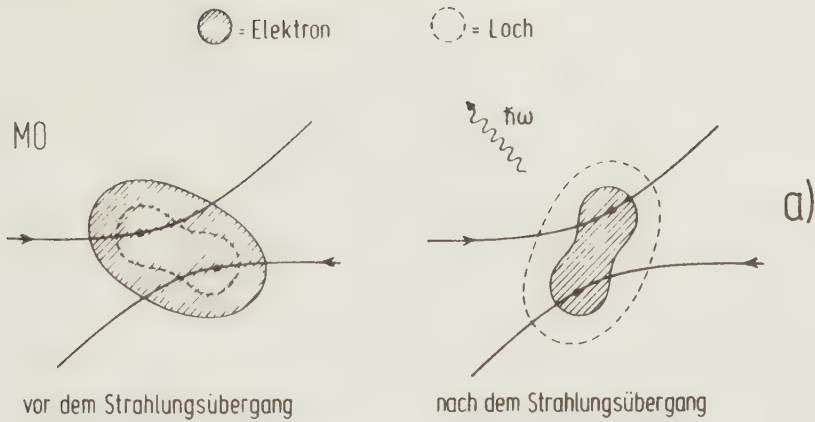
Die Quantenelektrodynamik (QED) gilt als vollständige theoretische Beschreibung aller elektromagnetischen Phänomene. Trotz ihrer formalen Mängel (Auftreten von Divergenzen in der Störungsentwicklung und Beseitigung dieser durch Renormierung) nimmt die QED dadurch eine einzigartige Stellung in der theoretischen Physik ein. Um so interessanter scheint es daher, sie in bislang experimentell nicht zugänglichen Bereichen zu testen. Derartige Forschungsgebiete wurden in den letzten Jahren durch Experimente an Schwerionen - Beschleunigern wie des Unilac in Wixhausen erschlossen.

Der Untersuchung von Schwerionenstößen im niederenergetischen Bereich, d.h. unterhalb der Coulomb - Barriere, liegt die Idee zugrunde, während eines Stoßvorganges extrem hohe elektrische und magnetische Felder zu erzeugen, wie sie in der Natur normalerweise nicht auftreten, ohne dabei die elektromagnetischen Prozesse in der Hülle durch störende Kernreaktionen stark zu beeinflussen oder gar zu verdecken.

Wichtigster Aspekt der theoretischen Vorhersage ist das Auftreten hoher elektronischer Bindungsenergien im vereinigten System, in dem sich die Kerne (Ladungen Z_1, Z_2) berühren und auf die Elektronen wie ein Kern mit der Gesamtladung $Z_{\text{UA}} = Z_1 + Z_2$ wirken. Diese beträgt im Uran - Uran Stoß z.B. 184 und liegt damit weit jenseits der natürlichen Grenze unseres Periodensystems. Ausgehend von der Dirac - Theorie werden für solche Ladungszahlen Bindungsenergien von der Größenordnung der Elektronenruhemasse erwartet. Insbesondere wird vorhergesagt, daß der $1s$ - Zustand ab $Z_{\text{UA}} > 173$ mit dem Positronenkontinuum entartet ist, was zur Folge hat, daß das neutrale Vakuum, der sogenannte Dirac - See, spontan zerfällt und nur ein geladenes Vakuum stabil ist¹. Die Zuordnung einer Eigenschaft wie Ladung zum Vakuum ist von fundamentaler Bedeutung und erfordert eine eingehende Analyse.

Für den Nachweis des Zerfalls überkritischer Systeme ($Z_{UA} > 173$) als Folge des "Eintauchens" der teilweise oder auch vollständig ionisierten K-Schale stehen gegenwärtig vier experimentelle Methoden zur Verfügung: die Messung von Positronen - Spektren^{2,3}, von Delta - Elektronen - Spektren⁴, von Locherzeugungsraten⁵ und der Anisotropie⁶⁻¹⁰ der Quasimolekularen Röntgenstrahlen^{11,12}. Die theoretische Beschreibung dieser Größen hat der Dynamik des Stoßprozesses Rechnung zu tragen, die neben spontanen auch zu induzierten Kopplungen der Elektronenzustände führt. Eine wesentliche Voraussetzung wird dabei sein, daß der Stoß adiabatisch verläuft, d.h., daß die Elektronen sich bedeutend schneller in ihren Orbitalen bewegen als die Kerne relativ zueinander. Auf diese Weise können sich sogenannte quasimolekulare Orbitale ("MO's") bilden, in denen die Elektronen ähnlich der Kovalenzbildung in der Chemie weder dem einen noch dem anderen Kern zugehören, sondern unter die Wirkung beider geraten.

Ein elektronischer Übergang zwischen solchen MO's kann zur Emission von Photonen führen. Daß die im Schwerionenstoß beobachtete Röntgenstrahlung quasimolekularen Ursprungs ist, läßt sich mit Hilfe der Doppler - Verschiebung eindeutig nachweisen^{11,13}. Figur 1.a stellt schematisch ein Quasimolekül vor und nach einem Strahlungsprozess dar. Das Loch in der inneren Schale kann von dem einlaufenden Ion stammen oder auch durch Anregung während des Stosses erzeugt werden. Durch einen Übergang aus einem äußeren MO kann es wieder gefüllt werden, wobei ein Photon emittiert wird. Dies führt zu den experimentell beobachteten MO - Röntgen - Spektren, dargestellt in Figur 1.b an einem typischen Beispiel⁸. Die Information über den Verlauf der elektronischen Bindungsenergien, insbesondere deren Wert im vereinigten System, läßt sich jedoch nicht aus der Figur extrahieren, da infolge der dynamischen Verbreiterung das Spektrum keine charakteristische Struktur bei der K_{α} - Linie des vereinigten Systems aufweist. Eine solche Struktur besitzt aber die Anisotropie¹⁴, definiert



Figur 1:

- (a) Schematische Darstellung der Strahlungsübergänge im Schwerionenstoß. Der Übergang erfolgt zwischen molekularen Orbitalen mit stetig veränderlicher Energiedifferenz.
- (b) Die quasimolekulare Röntgenstrahlung des Ni + Ni - Systems⁶. Das MO - Spektrum zeigt keine charakteristische Struktur bei der K_{α} - und K_{β} - Übergangsenergie des vereinigten Systems.

durch

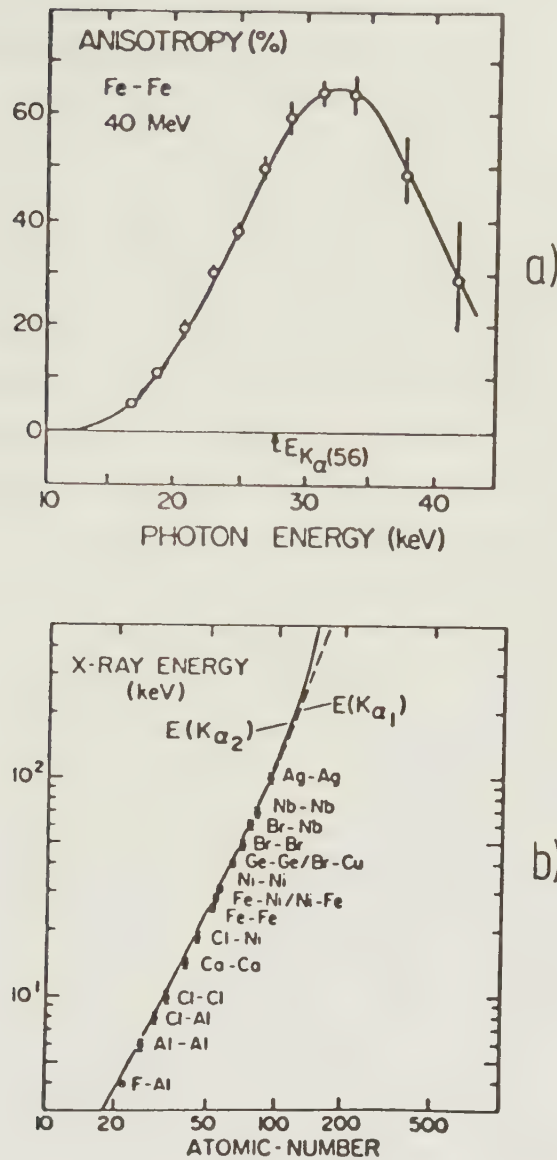
$$\eta(\omega) = \frac{d\sigma(\vartheta_K=90^\circ) - d\sigma(0^\circ)}{d\sigma(0^\circ)} \quad (1.1)$$

wobei ϑ_K der Winkel zwischen der Nachweisrichtung des Photons und der Strahlachse ist. Von zahlreichen Experimenten weiß man nämlich, daß η von der Photonenenergie ω abhängt und bei der Bindungsenergie des vereinigten Systems maximal wird, das sich auf diese Weise spektroskopieren läßt (Figur 2.a)^{10,15}. Eine systematische Untersuchung von Wölfli und seinen Mitarbeitern weist eindeutig einen Zusammenhang von Maximums- und K_α - Energie nach, der theoretisch schon von Müller und Greiner vermutet wurde¹⁴. Figur 2.b zeigt die Energie des Maximums, aufgetragen als Funktion von Z_{UA} , und zum Vergleich die nach der Schrödinger - Gleichung berechneten Energien (durchgezogene und gestrichelte Kurven). Die Verwendung der Schrödinger - Gleichung zur Berechnung der Bindungsenergien ist zulässig, da für mittelschwere Systeme relativistische Effekte nur eine kleine Rolle spielen.

Findet der Strahlungsübergang (Fig. 1.a) nicht im molekularen Bereich statt, sondern erst nachdem sich die Kerne weit genug voneinander entfernt haben, so können durch Beobachtung der charakteristischen Röntgenstrahlung der einzelnen Atome die Lochwahrscheinlichkeiten bestimmt werden. Bedauerlicherweise existiert aber kein exakter analytischer Zusammenhang zwischen Bindungsenergie und Lochwahrscheinlichkeit, so daß die Messung der Locherzeugungsraten nur bedingt Aufschluß über die Energien liefert.

Inhalt der vorliegenden Arbeit ist neben einer quantenfeldtheoretischen Formulierung des Schwerionenstoßes eine Untersuchung der K - Lochraten und der K - MO - Röntgenstrahlung.

Im folgenden Kapitel (Kap. 2) stellen wir zunächst den traditionellen Weg zur Berechnung von MO - Spektren vor. Als Anwendung diskutieren wir das Pb + Pb - System und werden dabei sehen, daß nur stark eingeschränkende Annahmen numerische Resultate ermöglichen. Dies ist auch der Grund dafür, daß es bislang noch keine befriedigende Erklärung



Figur 2:

- (a) Die Anisotropie der MO - Röntgenstrahlung in einem Fe + Fe Stoß als Funktion der Photonenenergie⁸. Die Die K_{α} - Linie des Quasiatoms ($Z_{uA} = 56$) liegt knapp unterhalb des Maximums der Anisotropie.
- (b) Plot der Energie des Anisotropie - Maximums gegen $Z_{uA} = Z_1 + Z_2$ ⁸. Die durchgezogene und die gestrichelte Kurve geben die berechneten K_{α} - Übergangsenergien an.

für die Anisotropie gibt. Keines der gegenwärtig bekannten Modelle^{12,16-18} ist in der Lage, sämtliche Eigenschaften der Anisotropie (wie z.B. die Abhängigkeit von der Einschußenergie¹⁹) vollständig zu erklären.

Eine alternative Beschreibung stellt das quantenfeldtheoretische Konzept dar, das im dritten Kapitel entwickelt wird, und das sich der herkömmlichen Methode vom praktischen Standpunkt als weit überlegen erweist. Natürlich sind formal beide Formulierungen äquivalent (Beweis im Anhang). Ihr wesentlicher Unterschied besteht darin, daß es im feldtheoretischen Ansatz bei Vernachlässigung der Elektron - Elektron - Wechselwirkung relativ einfach ist, das System vieler streuender Teilchen auf ein entsprechendes Einteilchensystem zurückzuführen.

In Kapitel 4 wird die im dritten Kapitel abgeleitete Strahlungsformel im Detail besprochen. Sie enthält Größen (z.B. die Zweizentrenfunktionen und den Photonenwellenvektor), die zunächst in verschiedenen Koordinatensystemen bestimmt werden, und die wir daher in ein System (z.B. das inertielle Schwerpunktsystem) transformieren müssen. Wir entwickeln dann das Strahlungsfeld in Multipole und sind dadurch in der Lage, die Winkelintegration der Matrixelemente analytisch auszuführen.

Als erste Anwendung der feldtheoretischen Beschreibung berechnen wir in Kapitel 5 die K - Locherzeugungsraten des Pb + Cm - Systems. Im Unterschied zu anderen Rechnungen, die auf der Monopolnäherung beruhen, beziehen wir auch die höheren Multipolmomente des Zweizentren - Coulomb - Potentials mit ein. Dazu stehen uns zwei Basen, die adiabatische und diabatische, zu Verfügung, deren Bedeutung wir an einem Zweizustandsmodell diskutieren. Wir vergleichen dann die numerischen Ergebnisse mit den Werten der Monopolapproximation und dem Experiment.

Das sechste Kapitel befaßt sich noch einmal mit der Strahlung des Pb + Pb - Systems, die nun aber nach den neuen Formeln berechnet wird. Es zeigt sich, daß die Rotationskopplung der quasistationären Einteilchenzustände,

die im Konfigurationsformalismus wegen des großen Aufwandes vernachlässigt werden mußte, einen wichtigen Einfluß auf den Hochenergiebereich der Spektren hat.

2. MO - Spektroskopie: Beschreibung durch Konfiguration

2.1 Theorie

In diesem Abschnitt stellen wir eine relativistische Erweiterung des Modells von Briggs und Dettmann²⁰ zur Berechnung von quasimolekularen Röntgenspektren vor. Zunächst teilen wir den Hamiltonoperator des Gesamtsystems in vier Teile:

$$H = \tilde{H}_N + \tilde{H}_e + H_R + H_W$$

wobei

$$\tilde{H}_N = \sum_{i_N} t_{i_N} + \frac{1}{2} \sum_{i_N \neq j_N} V_{i_N j_N}$$

den nuklearen Anteil,

$$\tilde{H}_e = \sum_{i_e} (\vec{\alpha} \cdot \vec{p}_{i_e} + \beta m_e) + \frac{1}{2} \sum_{i_e \neq j_e} V_{i_e j_e}$$

den elektronischen Anteil,

$$H_R = H_{EM} + H_{RAD}$$

den Strahlungsanteil und

$$H_W = \sum_{i_N, i_e} V_{i_N, i_e}$$

die Wechselwirkung zwischen dem nuklearen und dem elektronischen System darstellen. Für schwere Systeme kann das Problem wesentlich durch die semiklassische Näherung²¹ vereinfacht werden:

man nimmt an, daß sich das Projektil ungeachtet der elektronischen Prozesse entlang einer Coulomb - Trajektorie bewegt. Im Schwerpunktsystem (CM - System) hat $\tilde{H}_N$ dann die Form:

$$\tilde{H}_N = \frac{\vec{P}_R^2}{2\mu} + \frac{L^2}{2\mu R^2} + V_N(R)$$

wobei μ die reduzierte Masse, R der Abstand und $\vec{P}_R$ der Relativimpuls der Kerne ist. Da $\vec{L}$, der Bahndrehimpuls der Kerne, viel größer ist als der gesamte Drehimpuls der Hülle, $\vec{J}_e$, ist auch die folgende Näherung gut:

$$L^2 \approx I^2 - 2\vec{L} \cdot \vec{J}_e$$

mit $\vec{I} = \vec{L} + \vec{J}_e$, dem Gesamtdrehimpuls.

Wegen $\vec{L} = \mu R^2 \vec{\Omega}$ können wir daher schreiben:

$$H = H_N + H_e + H_R \quad (2.1)$$

wobei

$$H_N = \frac{\vec{p}_R^2}{2\mu} + \frac{I^2}{2\mu R^2} + V_N(R)$$

$$H_e = H_0 + H_{COR}$$

mit

$$H_0 = \sum_{ie} \left[\vec{\alpha} \cdot \vec{p}_{ie} + \beta m_e + V_{TC}(\vec{r}_{ie}, R) \right] + \frac{1}{2} \sum_{ie+je} V_{ie,je}$$

$$H_{COR} = -\vec{\Omega} \cdot \vec{J}_e$$

Der Coriolis-term, H_{COR} , tritt durch den Ansatz von H_N auf: das Koordinatensystem rotiert mit der Kernbewegung, wobei üblicherweise die Z - Achse in der Verbindungslinie der Kerne liegt. Für die Kopplung ans freie Strahlungsfeld $\vec{A}$, in der Fock - Darstellung gegeben durch

$$\vec{A}(\vec{x}, t) = \sum_{\vec{k}, \lambda} d_{\vec{k}, \lambda} \vec{q}_{\vec{k}, \lambda}(\vec{x}, t) + d_{\vec{k}, \lambda}^{\dagger} \vec{q}_{\vec{k}, \lambda}^*(\vec{x}, t) \quad (2.2)$$

berücksichtigen wir nur den Ladungsstrom der Elektronen, die durch den Kernstrom erzeugte Bremsstrahlung werden wir separat behandeln^{22,23}. $d_{\vec{k}, \lambda}^{\dagger}, d_{\vec{k}, \lambda}$ sind die Photonenerzeugungs- und Vernichtungsoperatoren und $\vec{q}_{\vec{k}, \lambda}$ die Basisvektoren

$$\vec{q}_{\vec{k}, \lambda}(\vec{x}, t) = \vec{q}_{\vec{k}, \lambda}(\vec{x}) e^{-i\omega t} = \frac{1}{(\nu 2\omega)^{1/2}} \vec{\epsilon}_{\lambda} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x} - i\omega t} \quad (2.2a)$$

Die zugehörigen Kommutatoren und Orthogonalitätsrelationen werden wir in Abschnitt 3.4 diskutieren. Es folgt für H_R :

$$\begin{aligned} H_R &= H_{EM} + H_{RAD} \\ &= \sum_{\vec{k}, \lambda} \omega_k d_{\vec{k}, \lambda}^{\dagger} d_{\vec{k}, \lambda} - e \vec{\alpha} \cdot \vec{A} \end{aligned} \quad (2.3)$$

Sofern der Translation der Elektronen z.B. durch Verwendung von Translationskoeffizienten Rechnung getragen wird²⁴, sind für die MO - Spektroskopie nur die beiden letzten Terme in (2.1), $H_e + H_R$, von Bedeutung. Die Schrödinger - Gleichung des elektronischen Systems unter Einbeziehung der Strahlung ist dann gegeben durch:

$$(H_0 + H_{COR} + H_{EM} + H_{RAD}) \Psi_T = i \partial_t \Psi_T \quad (2.4)$$

Gleichung (2.4) ist der Volterra'schen Integralgleichung

$$\Psi_T(t) = \chi_i^{(+)}(t) |0\rangle_R - i \int_{-\infty}^t dt' U(t,t') H_{RAD} \Psi_T(t') \quad (2.5)$$

äquivalent, wenn $U(t,t')$, der Zeitentwicklungsoperator, die Gleichung

$$(H_0 + H_{COR} + H_{EM}) U(t,t') = i \partial_t U(t,t') \quad (2.5a)$$

mit $U(t,t) = 1$

erfüllt, wie man durch Einsetzen von (2.5) in (2.4) zeigen kann. Ferner ist $|0\rangle_R$ das Photonenvakuum und $\chi_i^{(+)}(t)$ die Lösung des elektronischen Streuproblems ohne Strahlungsfeld

$$(H_0 + H_{COR}) \chi_i^{(+)} = i \partial_t \chi_i^{(+)} \quad (2.6)$$

die nach adiabatischen Lösungen der Vielteilchen - Zweizentren - Dirac - Gleichung entwickelt werden kann:

$$\chi_i^{(+)}(t) = \sum_m a_{im}^{(+)}(t) e^{-i \int^t dt' E_m} |m(R)\rangle \quad (2.7)$$

wobei

$$H_0 |m(R)\rangle = E_m(R) |m(R)\rangle \quad (2.8)$$

Gleichung (2.7) in (2.6) eingesetzt führt auf ein System

gekoppelter Differentialgleichungen 1. Ordnung:

$$\dot{a}_{in}^{(+)} = - \sum_m a_{im}^{(+)} e^{i \int_{-\infty}^t dt' (E_n - E_m)} \langle n | \partial_t + i H_{cor} | m \rangle \quad (2.9)$$

Der Index i sowie das $(+)$ - Zeichen charakterisieren die Randbedingung

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} a_{im}^{(+)} = \delta_{im} \quad (2.10)$$

Alternativ dazu steht die Lösung $\chi_f^{(-)}(t)$ mit der Randbedingung bei $t = +\infty$:

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} a_{fm}^{(-)} = \delta_{fm} \quad (2.11)$$

Der Ansatz (2.5) und entsprechend die Wahl von $U(t, t')$ als Lösung von (2.5a) erlauben eine Störungsentwicklung bezüglich der Strahlungswechselwirkung. In 1. Ordnung erhält man:

$$\Psi_T^{(1)}(t) = \chi_i^{(+)}(t) |0\rangle_k - i \int_{-\infty}^t dt' U(t, t') H_{RAD} \chi_i^{(+)}(t') |0\rangle_k \quad (2.12)$$

Die Wahrscheinlichkeit zur Zeit t die Konfiguration $|f\rangle$, definiert in (2.8), und ein Photon mit Impuls $\vec{k}$ und Polarisation λ zu finden, ist dann (ebenfalls in 1. Ordnung) gegeben durch das Quadrat der Strahlungsamplitude

$$\begin{aligned} c_{k\lambda}^{fi}(t) &= \langle \vec{q}_{k\lambda}(\vec{x}, t) | \langle f(t) | \Psi_T^{(1)}(t) \rangle \\ &= -i \int_{-\infty}^t dt' \langle \vec{q}_{k\lambda}(\vec{x}, t) | \langle f(t) | U(t, t') H_{RAD} | \chi_i^{(+)}(t') \rangle | 0 \rangle_k \end{aligned}$$

Wegen

$$\begin{aligned} \langle \vec{q}_{k\lambda}(\vec{x}, t) | \langle f(t) | U(t, t') &= \\ &= \langle \vec{q}_{k\lambda}(\vec{x}, t) | \langle f(t) | U^\dagger(t', t) \\ &= \langle \vec{q}_{k\lambda}(\vec{x}, t') | \langle \chi_f^{(-)}(t') | \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} \langle \vec{q}_{k\lambda} | H_{RAD} | 0 \rangle_k &= \langle \vec{q}_{k\lambda} | -e\vec{\alpha} \sum_{k'\lambda'} d_{k'\lambda'}^+ \vec{q}_{k'\lambda'}^*(\vec{x}) e^{i\omega t} | 0 \rangle_k \\ &= -e\vec{\alpha} e^{i\omega t} \vec{q}_{k\lambda}^*(\vec{x}) \end{aligned}$$

(siehe Gleichung (2.2), (2.2a), (2.3)) gilt:

$$c_{k\lambda}^{fi} = -i \int_{-\infty}^t dt' e^{i\omega t'} \langle \chi_+^{(-)}(t') | (-e\vec{\alpha}) \vec{q}_{k\lambda}^*(\vec{x}) | \chi_+^{(+)}(t') \rangle \quad (2.13)$$

so daß sich mit Entwicklung (2.7) ergibt:

$$\begin{aligned} c_{k\lambda}^{fi}(t \rightarrow \infty) &= -i \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \sum_{n,m} a_{fn}^* a_{im} \times \\ &\times e^{i \int dt' (E_n - E_m)} \langle n | (-e\vec{\alpha}) \vec{q}_{k\lambda}^*(\vec{x}) | m \rangle \end{aligned} \quad (2.14)$$

Schließlich folgt für das differentielle Strahlungsspektrum:

$$\frac{d\mathcal{G}}{d\Omega_N} = \left(\frac{d\mathcal{G}}{d\Omega_N} \right)_{Ruth} \sum_{f,i\lambda} |c_{k\lambda}^{fi}(\infty)|^2 \frac{V\omega^2 d\omega d\Omega_k}{(2\pi)^3} \quad (2.15)$$

Der letzte der 3 Faktoren in (2.15) beschreibt die Zahl der Photonen im Energiebereich $(\omega, \omega+d\omega)$, das dabei auftretende Normierungsvolumen kürzt sich heraus (siehe Gleichung (2.2a)) und wird im Folgenden nicht mehr berücksichtigt. Das totale Spektrum erhält man durch Integration über die Photonen- und Streuwinkel Ω_k bzw. Ω_N :

$$\frac{d\mathcal{G}}{d\omega} = 2\pi \int_0^\infty b db \frac{dP(b,\omega)}{d\omega} \quad (2.16)$$

mit

$$\frac{dP(b,\omega)}{d\omega} = \frac{\omega^2}{(2\pi)^3} \int_{\Omega_k} d\Omega_k \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi_N \sum_{f,i\lambda} |c_{k\lambda}^{fi}|^2 \quad (2.17)$$

$dP/d\omega$ gibt die über φ_N gemittelte Emissionswahrscheinlichkeit für Photonen der Energie ω entlang einer bestimmten Hyperbel $b(\varphi_N)$ an.

2.2 Das Pb + Pb - System

Als Anwendung berechnen wir nun das K - MO - Spektrum des Pb + Pb - Systems und beginnen mit einer Diskussion der wesentlichen Näherungen:

- (a) Die adiabatischen Zustände (2.8) bilden eine geeignete Basis, wenn wie bereits erwähnt die Kernbewegung v_p langsam ist im Vergleich zur Orbitalgeschwindigkeit der Elektronen v_e :

$$v_p < v_e \approx \sqrt{\frac{E_B}{m_e}}$$

Der folgenden Tabelle, die das Verhältnis $\frac{v_e}{v_p}$ für verschiedene Einschußenergien (900, 1000, 1200 MeV) zeigt, liegen die elektronischen Bindungsenergien bei 500 fm Kern - Kern - Abstand zugrunde, wo sich die quasiautomare K - Schale ausgebildet hat²⁵:

	900	1000	1200
1s _e	8,2	7,7	7,1
2p _{3/2, e, π}	4,5	4,3	3,9
3p _{3/2, e, π}	3,0	2,8	2,6

Offensichtlich ist die Adiabasie auch für die schwächer gebundenen Niveaus keine allzu schlechte Annahme.

- (b) Der Einfluß der Elektron - Elektron - Wechselwirkung auf die Strahlungsmatrixelemente wird vernachlässigt²⁶. Die Abschirmung und die damit verbundene Energieverschiebung der Elektronen, die dadurch nicht berücksichtigt werden, dürften hauptsächlich zu geringeren Übergangsenergien und zu größeren Ionisationswahrscheinlichkeiten führen.

- (c) Für die Berechnung von Spektren ist die Rotationskopplung nicht wichtig und wird daher zunächst vernachlässigt. Ihr Einfluß ist jedoch für die Anisotropie von großer Bedeutung¹⁷. Wir kommen darauf später zurück.
- (d) Die Wechselwirkung der Elektronen mit dem Kern wird beschrieben durch das Zweizentren - Coulomb - Potential

$$V_{TC}(\vec{r}_i, R) = - \frac{Z_1 e^2}{|\vec{r}_i - \frac{M_2}{M_1 + M_2} R \vec{e}_z|} - \frac{Z_2 e^2}{|\vec{r}_i + \frac{M_1}{M_1 + M_2} R \vec{e}_z|} \quad (2.18)$$

wobei $\vec{r}_i$ der Ortsvektor des i-ten Elektrons im mitrotierenden CM - System ist. Z_1, M_1 und Z_2, M_2 sind Ladung und Masse der beiden Kerne. Die Näherung besteht hierbei in der Vernachlässigung der Kernaushdehnung.

- (e) Für die K- Strahlung überschwerer Systeme ist es ausreichend, nur Einstoß - Prozesse zu betrachten, in denen das K - Loch in einer einzigen Kollision erzeugt und durch Strahlungsübergang auch wieder gefüllt wird:

Blei kristallisiert in der kubisch - dichtesten Kugelpackung, so daß jedes Targetatom 12 direkte Nachbaratome hat. Die Flugzeit τ_F des Projektils zwischen zwei Targetkernen beträgt daher

$$\tau_F = \frac{2\tau_A}{v_p} \approx \frac{2\tau_A}{0.1c}$$

wobei τ_A der Atomradius ist. Die Wahrscheinlichkeit, ein in einem vorausgegangenen Stoß erzeugtes K - Loch in einen neuen Stoß zu bringen, ist gegeben durch

$$W = \left(1 - e^{-\frac{\tau_F}{\tau_L}}\right) \cdot \frac{12\pi\tau_K^2}{4\pi\tau_A^2}$$

$$= \left(1 - e^{-\frac{\tau_F}{\tau_L}}\right) \cdot \left(\frac{\sqrt{3}a_0}{2\tau_A}\right)^2$$

τ_L ist dabei die Lebensdauer eines K - Loches, r_K der K - Schalenradius und $a_0 = 0.53 \times 10^5$ fm der Bohrradius. Der letzte Faktor gibt die Wahrscheinlichkeit an, daß das Projektil im zweiten Stoß in den Bereich der K - Schale eines der 12 umgebenden Atome gelangt. Setzt man die für Blei charakteristischen Werte ein ($\tau_L = 10^{-17}$ s, $r_K = 1.75 \times 10^5$ fm), folgt

$$\omega \approx 2 \times 10^{-5}$$

Dieser kleine Wert rechtfertigt die Annahme (e). Die Berechnung des K - Spektrums kann man nun durch die 4 folgenden Schritte darstellen:

1. Schritt:

Zunächst muß das Eigenwertproblem (2.8) gelöst werden. Annahme (b) erlaubt es, aus den entsprechenden Einteilchen-Lösungen $\psi_i(\vec{r}_i, R)$ die N - Elektronen - Konfigurationen $|m(R)\rangle$ durch Bildung von Slaterdeterminanten zu konstruieren:

$$|m\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(1) & \dots & \psi_1(N) \\ \vdots & & \vdots \\ \psi_N(1) & \dots & \psi_N(N) \end{vmatrix}$$

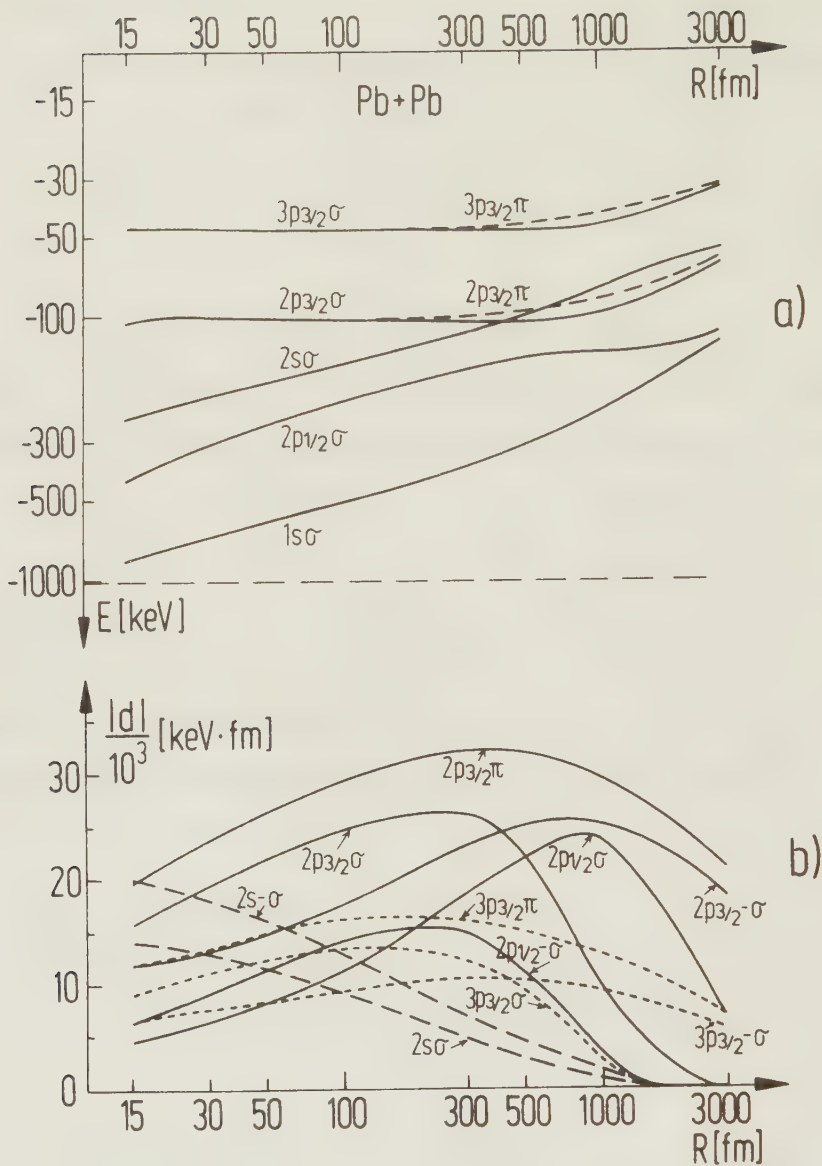
Die Energieeigenwerte $E_m(R)$ erhält man durch Summation über die Einteilchenenergien $\omega_i(R)$ der zugehörigen Konfiguration $|m\rangle$:

$$E_m = \sum_i \omega_i$$

Figur 3.a zeigt das Einteilchen - Korrelationsdiagramm für das Pb + Pb - System, d.h. den Verlauf der Einteilchenenergien als Funktion des Zweizentren - Abstands.

2. Schritt

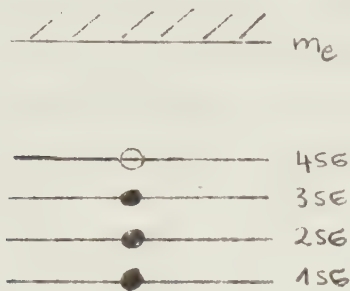
Da wir vorerst nur am K - Spektrum interessiert sind, können wir uns bei der Lösung von (2.9) auf die Berechnung der



Figur 3:

- (a) Das Pb + Pb - Korrelationsdiagramm.
- (b) Die Strahlungsübergangsmatrixelemente der eingezeichneten Zustände in das $1s\sigma$ - Niveau, berechnet im Grenzfall langer Wellenlängen. Durchgezogen bzw. gepunktet sind die E1 - Übergänge, gestrichelt die M1 - Übergänge.

K - Ionisation beschränken. Die Besetzung der Niveaus, die einen Strahlungsübergang in die K- Schale zulassen, wird im nächsten Schritt bestimmt. Zunächst berücksichtigen wir, daß für symmetrische Systeme wegen der Paritätserhaltung nur $(s, +\epsilon)$ - mit $(s, +\epsilon)$ - Zuständen koppeln können, sofern die Rotationskopplung vernachlässigt wird (Annahme (c)). Um die Zahl der gekoppelten Kanäle (= Konfigurationen) in einem praktikablen Rahmen zu halten, können wir daher mit folgendem Modell arbeiten:



Zu Beginn seien die unteren 3 s- Niveaus besetzt, der 4s ϵ - Zustand und das Kontinuum leer. Die Kopplung der K - Schale ans Kontinuum behandeln wir störungstheoretisch:

$$a_{1s}(t, \omega_{\text{KONT}}) = - \int_{-\infty}^t dt' e^{i \int_{t'}^t dt'' (\omega_{\text{KONT}} - \omega_{1s})} \langle \psi_{\omega_{\text{KONT}}} | \partial_{t'} | \psi_{1s} \rangle$$

während das System der 4 Kanäle gebundener Zustände exakt gelöst wird. Bezüglich der ∂_t - Matrixelemente sind 2 Anmerkungen zu machen: erstens wurde bei ihrer Berechnung die Monopol - Näherung verwendet, d.h. in der Entwicklung des Zweizentren - Coulomb - Potentials nur der 1. Term berücksichtigt. (Davon beeinflusst sind die Resultate der Figuren 3 - 10, spätere Rechnungen basieren auf den exakten Matrixelementen). Zweitens wurden die ∂_R - Matrixelemente

$$\dot{R} \langle \psi_n | \partial_R | \psi_m \rangle = \langle \psi_n | \partial_t | \psi_m \rangle \quad (2.19)$$

modifiziert, um die Translation der Elektronen miteinzubeziehen. Dies geschieht am einfachsten dadurch, daß man ab einem charakteristischen Zweizentren - Abstand (2000 fm für Pb + Pb) einen exponentiellen Abfall annimmt²⁷.

3. Schritt

Wir führen nun in unser Modell die p - Niveaus der L - und

M - Schale ein, die während des ganzen Stoßes voll besetzt sein sollen. Das System geht daher direkt nach dem Strahlungsprozeß in den Endzustand über, so daß sich der Ausdruck für die Amplitude (2.14) vereinfacht:

$$c_{k\lambda}^{ei} = -i \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} a_{1s} e^{i \int dt' (\omega_{1s} - \omega_e + \omega)} \langle \varphi_{1s} | (-e\vec{r}) \cdot \vec{q}_{k\lambda}^* | \varphi_e \rangle \quad (2.20)$$

Der Index 1 läuft über alle Einteilchen - Zustände, die einen Strahlungsübergang in die K - Schale erlauben, d.h. für Dipolstrahlung über alle p - Niveaus. Der Grund dafür liegt in der Modellannahme, daß nur Konfigurationen mit einem Loch auftreten. Zur Berechnung der Strahlungsmatrixelemente gehen wir über die Dipolnäherung hinaus zur Näherung langer Wellenlängen, d.h. wir ersetzen

$$\vec{q}_{k\lambda} = \frac{1}{(R\omega)^{1/2}} \vec{E}_\lambda e^{i\vec{k}\vec{r}} \rightarrow \frac{1}{(R\omega)^{1/2}} \vec{E}_\lambda \quad (2.21)$$

Dies ist nur dann korrekt, wenn

$$|\vec{k} \cdot \vec{r}| \ll 1 \quad (2.21a)$$

was später noch getestet wird (Abschnitt (6.1)). In unserem Modell (1s, 2s, 3s, 4s, s - Kontinuum, p - Niveaus der L - und M - Schale) existieren dann die Übergänge in das 1s - Niveau von den Zuständen

$$2p_{1/2 \pm 1/2}, 2p_{3/2 \pm 1/2}, 2p_{3/2 \pm 3/2}, 3p_{1/2 \pm 1/2}, 3p_{3/2 \pm 1/2}, 3p_{3/2 \pm 3/2}$$

Durch Annahme (2.21) und mit

$$-e\vec{r} = -ie [\pi_0, \vec{r}]$$

können die zugehörigen Matrixelemente noch umgeformt werden

$$\begin{aligned} \langle \varphi_{1s} | -e\vec{r} \cdot \vec{E}_\lambda | \varphi_e \rangle &= -ie \vec{E}_\lambda (\omega_{1s} - \omega_e) \langle \varphi_{1s} | \vec{r} | \varphi_e \rangle \\ &= -ie \vec{E}_\lambda \cdot \vec{d}_{1se} \end{aligned} \quad (2.22)$$

In Fig. 3.b sind die einzelnen Übergangsmatrixelemente $d = |\Delta\omega\langle\tau\rangle|$ dargestellt. Die M1 - Übergänge $2s\pm\frac{1}{2} \rightarrow 1s$ wurden in der Monopol - Näherung²⁸ berechnet. Das sollte eine gute Näherung sein, da sie offensichtlich nur bei sehr kleinen Abständen R mit den E1 - Übergängen vergleichbar sind. Diese zeigen alle ein ähnliches Verhalten: in der ersten Phase der Annäherung (ungefähr bis 300 fm) wachsen sie gemäß der Zunahme von $\Delta\omega$. Für kleine Abstände nehmen sie ab, was dem starken Schrumpfen des K - Schalenradius schwerer Systeme entspricht.

Um die Zeitintegration in (2.20) auszuführen, benötigen wir einen Zusammenhang zwischen R und t, der durch die übliche Parametrisierung der Rutherford - Hyperbel gegeben wird:

$$R = a (\varepsilon \cosh \xi + 1)$$

$$t = \left(\frac{\mu}{2E_{cm}} \right)^{1/2} a (\varepsilon \sinh \xi + \xi) \quad (2.23)$$

$$a = \frac{z_1 z_2 e^2}{2E_{cm}} \quad , \quad \varepsilon = \left(1 + \left(\frac{b}{a} \right)^2 \right)^{1/2}$$

b ist dabei der Stoßparameter, μ die reduzierte Masse und E_{cm} die Einschußenergie im CM - System.

Das Zeitintegral in (2.20) wird in 3 Teile zerlegt:

$$\int_{-\infty}^{\infty} = \int_{-\infty}^{-T} + \int_{-T}^{+T} + \int_{+T}^{\infty} \quad (2.24)$$

T wird so gewählt, daß $Q_{1s}(t) = 0$ für $t \leq -T$ gilt, weshalb das 1. Integral verschwindet.

Die Rechnung zu diesem Kapitel verwenden einen T - Wert mit $R(T) = 2500$ fm, spätere Rechnungen (Kap. 6) wurden durchgeführt mit $R(T) = 4000$ fm. Das 2. Integral in (2.24) wird numerisch ausgewertet. Es zeigt als Fourier - Integral über einem endlichen Bereich im Spektrum eine oszillierende Struktur. Um diese künstlichen Oszillationen zu eliminieren,

muß das 3. Integral geeignet approximiert und addiert werden. Unter der Voraussetzung, daß sich der Integrand (bis auf die Phasenfaktoren) für $t \geq T$ nicht mehr ändert, erhalten wir:

$$\int_T^\infty \sim \frac{i d_{1s e}(T) a_{1s}(T)}{\omega_{1s} - \omega_e + \omega - i \Gamma/2} e^{i \int_{-T}^T dt (\omega_{1s} - \omega_e + \omega)} \quad (2.25)$$

wobei Γ die K - Linienbreite von Blei ist, die außerhalb eines sehr kleinen Bereichs um die K - Linie vernachlässigt werden kann.

Figur 4 stellt die Wirkung dieses Verfahrens dar: Der zunächst oszillierende, differentielle Querschnitt $\frac{dP}{d\omega}$ wird nach Addition des Integrals (2.25) zur Strahlungsamplitude geglättet.

Die nächste Figur (Fig.5) zeigt das Betragsquadrat der Strahlungsamplitude für eine Ionisation des $1s e^-$ - Elektrons in den $\omega_{KONTR} = 1.02 m_e$ - Zustand. Den starken Oszillationen im Eingangskanal folgt nach dem Punkt größter Annäherung ein exponentielles Anwachsen. Der Punkt der auslaufenden Trajektorie, wo Übergangs- und Photonenenergie gleich sind (Pfeil), stimmt offensichtlich nicht mit dem Maximum der Emissionswahrscheinlichkeit überein, wie es von der Approximation stationärer Phasen vorausgesagt wird.

4. Schritt

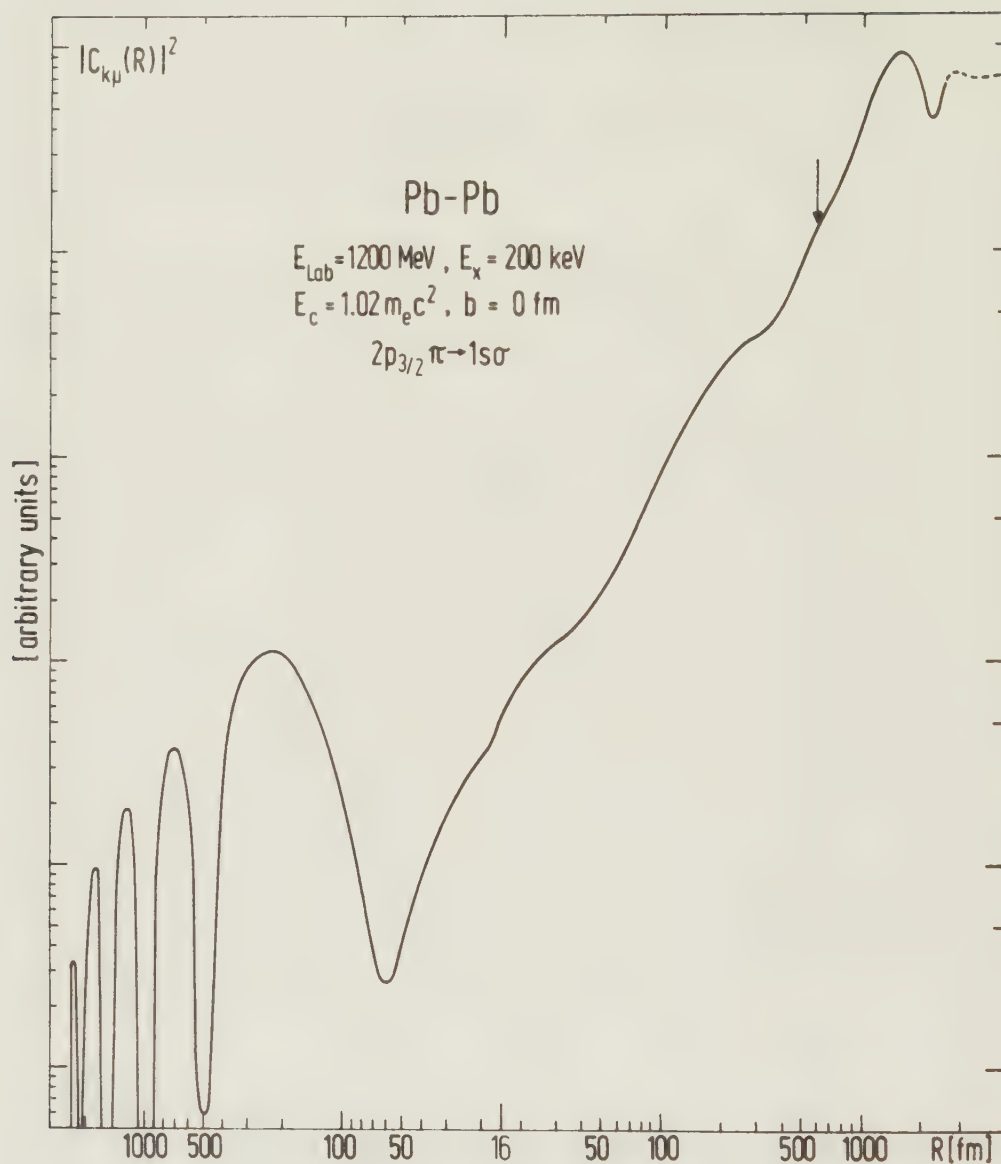
Im letzten Schritt berechnen wir die Querschnitte nach den Formeln (2.16) und (2.17).

Figur 6 zeigt die Beiträge der 2 verschiedenen Anregungsprozesse zum Spektrum. Die Kurve "Es_e" stellt den Beitrag von der Ionisation ins Kontinuum, "4s_e" den der Anregung in höhere gebundene Zustände dar, "MO" ist die Summe. Zum Vergleich ist die Kern - Kern Quadrupol - Bremsstrahlung (NNB) angegeben²⁹, die den dominanten Anteil des Strahlungsuntergrunds stellt. Dipol - Bremsstrahlung tritt nicht auf, da wir ein symmetrisches System betrachten. Ein weiterer großer Vorteil des Pb + Pb - Systems liegt in der Tatsache, daß der γ - Zerfall Coulomb - angeregter Kerne keine Rolle spielt, weil die beiden niedrigsten Zustände



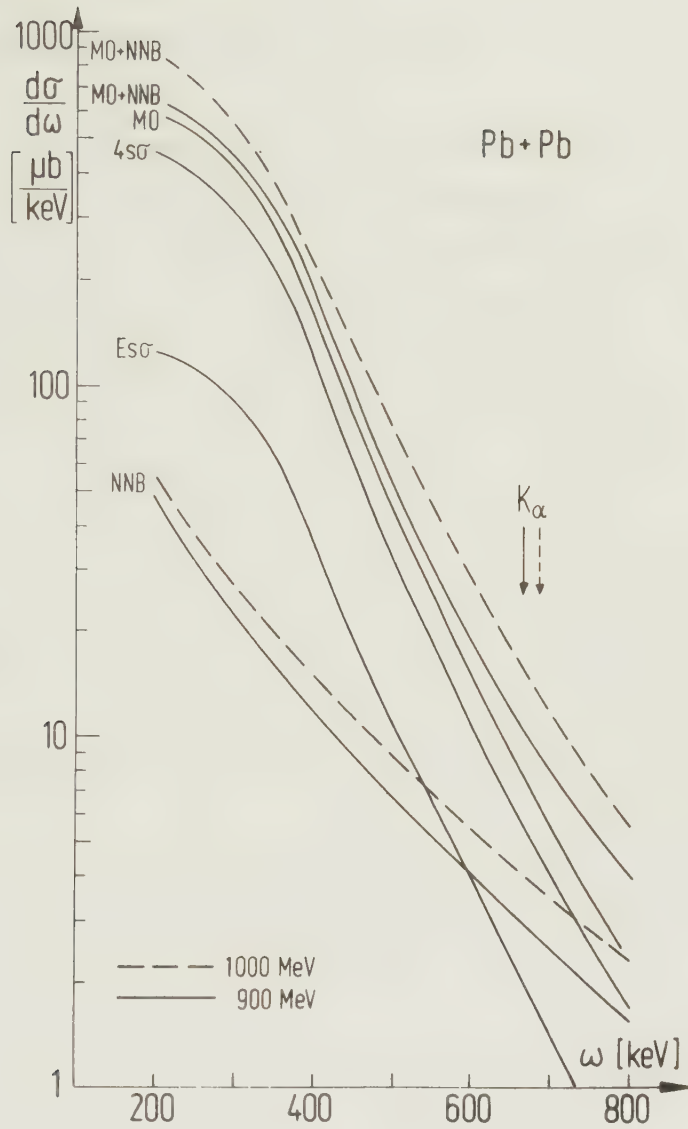
Figur 4:

Die Photonemissionswahrscheinlichkeit entlang einer Trajektorie als Funktion der Photonenenergie. $\frac{dP}{d\omega}$ wird über die Strahlungsamplitude berechnet (Gl. (2.17)) und oszilliert, falls sich die Fourierintegration in (2.20) nur von $-T$ bis $+T$ erstreckt. Diese Oszillationen verschwinden, wenn das Integral von $+T$ bis unendlich addiert wird.



Figur 5:

Das Betragsquadrat der Strahlungsamplitude als Funktion des Zweizentrenabstands. Das K - Elektron ist in den $1.02 m_e$ - Kontinuumszustand ionisiert. Der Strahlungsübergang findet zwischen dem $2p_{3/2} \pi$ - und dem $1s \sigma$ - Zustand statt, wobei ein 200 KeV - Photon emittiert wird. Der Pfeil markiert den Punkt, wo die Übergangs- mit der Photonenenergie übereinstimmt.



Figur 6:

Das $\text{Pb} + \text{Pb} - \text{MO} - \text{Spektrum}$ (MO) und die Beiträge von Anregung ($4s\sigma$) und Ionisation ($E_s\sigma$) sowie der $\text{NNB} - \text{Untergrund}$ für 900 MeV Projektil - Energie (durchgezogene Kurve) bzw. 1000 MeV (gestrichelte Kurve). $\text{MO} + \text{NNB}$ gibt die Summe des vollständigen $\text{MO} - \text{Spektrums}$ ($=4s\sigma + E_s\sigma$) mit der Bremsstrahlung (NNB) an. Die jeweilige $K_\alpha - \text{Energie}$ am Punkt größter Annäherung der Kerne ist durch den entsprechenden Pfeil gekennzeichnet.

in ^{208}Pb , der 3^- und der 2^+ - Zustand, mit Querschnitten von 11 mb bzw. 0.26 mb angeregt werden (in 927 MeV Kollisionen)³⁰.

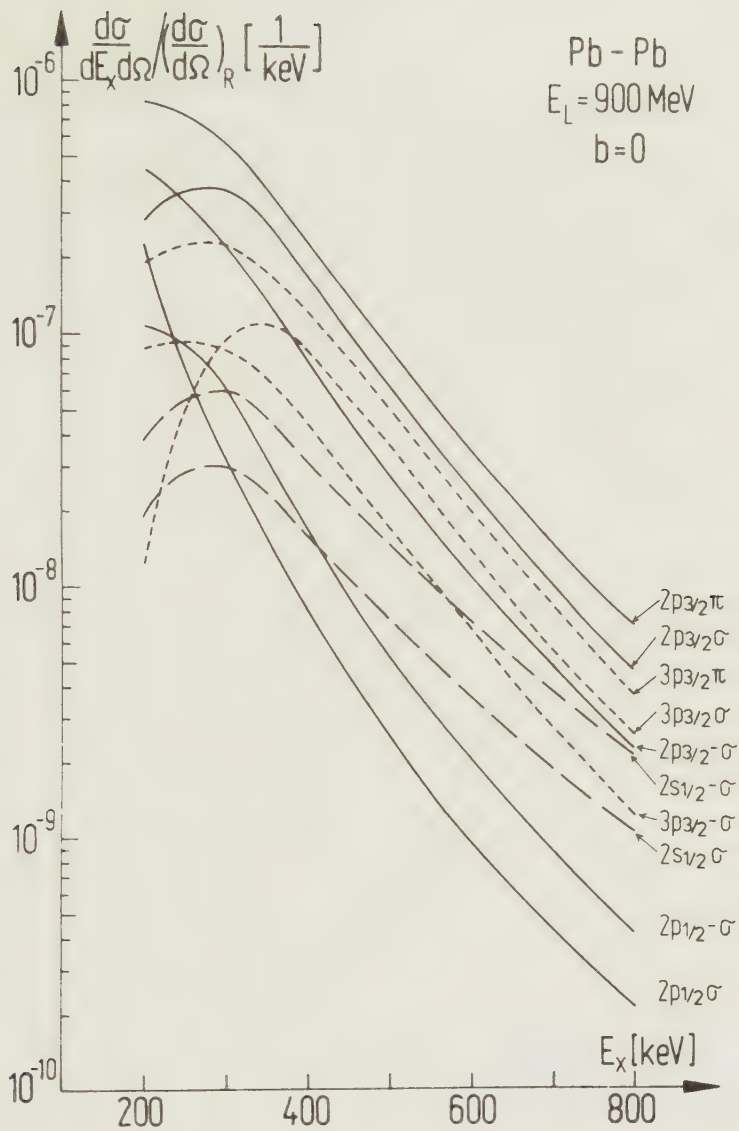
Auch der Beitrag der Sekundärelektronenbremsstrahlung (SEB) ist vernachlässigbar, wie man leicht abschätzen kann³¹. Die durchgezogenen Kurven in Fig. 6 sind für 900 MeV, die gestrichelten für 1000 MeV Einschußenergie (Labor - System) gerechnet. Man kann erkennen, daß das MO - Spektrum erst weit hinter der K_α - Linie des vereinigten Systems (durch die Pfeile markiert) in den NNB - Untergrund eintaucht.

In Figur 7 sind die Beiträge der einzelnen Strahlungsübergänge zum Spektrum für einen Zentralstoß ($b = 0$) dargestellt. Die Dominanz der $p_{3/2}$ - Zustände läßt sich durch die bei gegebenem R höchsten Übergangsenergien begründen. Die Kurven sind, so zu sagen, zu höheren Photonenenergien verschoben. Wir erwähnen, daß die Beiträge der $3p_{1/2} \pm 1/2$ - Zustände etwa 100 mal kleiner als die $p_{3/2}$ - Übergänge sind und daher vernachlässigt wurden.

Die beiden nächsten Figuren (Fig. 8, 9) zeigen die b - und ω -Abhängigkeit der Emissionswahrscheinlichkeit $dP/d\omega$. In Figur 8 sind die Beiträge verschiedener Stoßparameter zum Spektrum aufgetragen. Der exponentielle Abfall wird stärker mit zunehmendem Stoßparameter. Gestrichelt eingezeichnet ist wieder die NNB. In Figur 9 ist b die Variable und ω der Parameter. Ein Vergleich mit den jüngsten Experimenten von Schmidt - Böcking und Mitarbeitern³² ergibt eine gute Übereinstimmung.

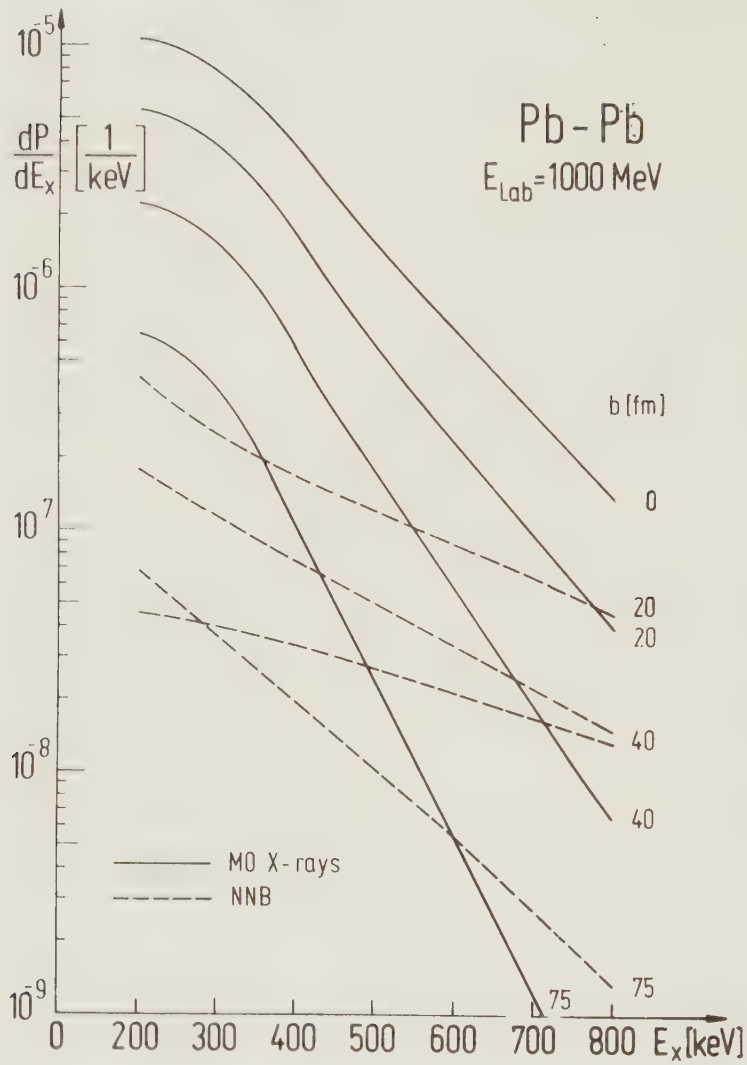
Figur 10 schließlich vergleicht unsere Resultate mit den experimentellen Daten von W.E. Meyerhof, W. Wölfli und Mitarbeitern³³. Während die absolute Größe bei ca. 400 KeV recht gut mit dem Experiment übereinstimmt, ist der exponentielle Abfall zu steil. Die Diskrepanz im niederenergetischen Bereich tritt auf, weil wir die Strahlung in höhere Schalen nicht berücksichtigt haben.

In der Skizze sind die Einteilchenenergien als Funktion der Zeit sowie die K - Strahlung (a) und die L - Strahlung (b) schematisch dargestellt. Da die Bindungsenergie der quasimolekularen L - Schale zwischen 100 KeV und 300 KeV variiert,



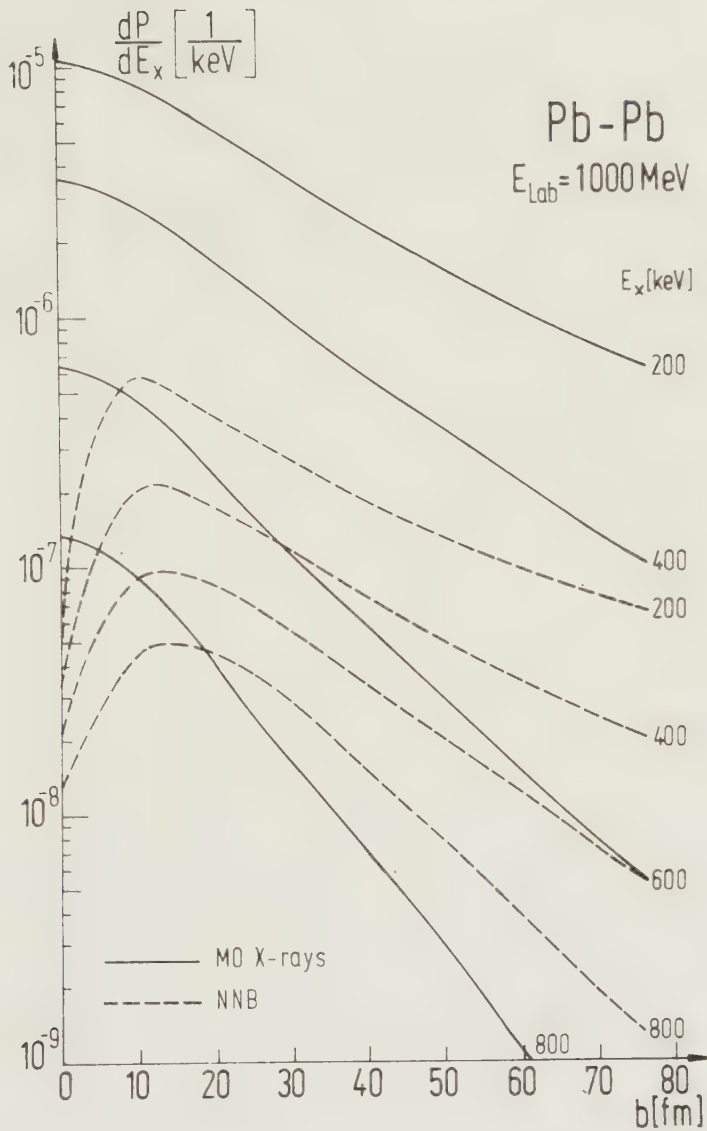
Figur 7:

Die Beiträge der verschiedenen Strahlungsübergänge in die K - Schale zum differentiellen Querschnitt als Funktion der Photonenenergie bei Stoßparameter $b = 0$ und 900 MeV Einschußenergie. Die Übergänge von den π - Niveaus sind dominant verglichen mit den übrigen der gleichen Schale.



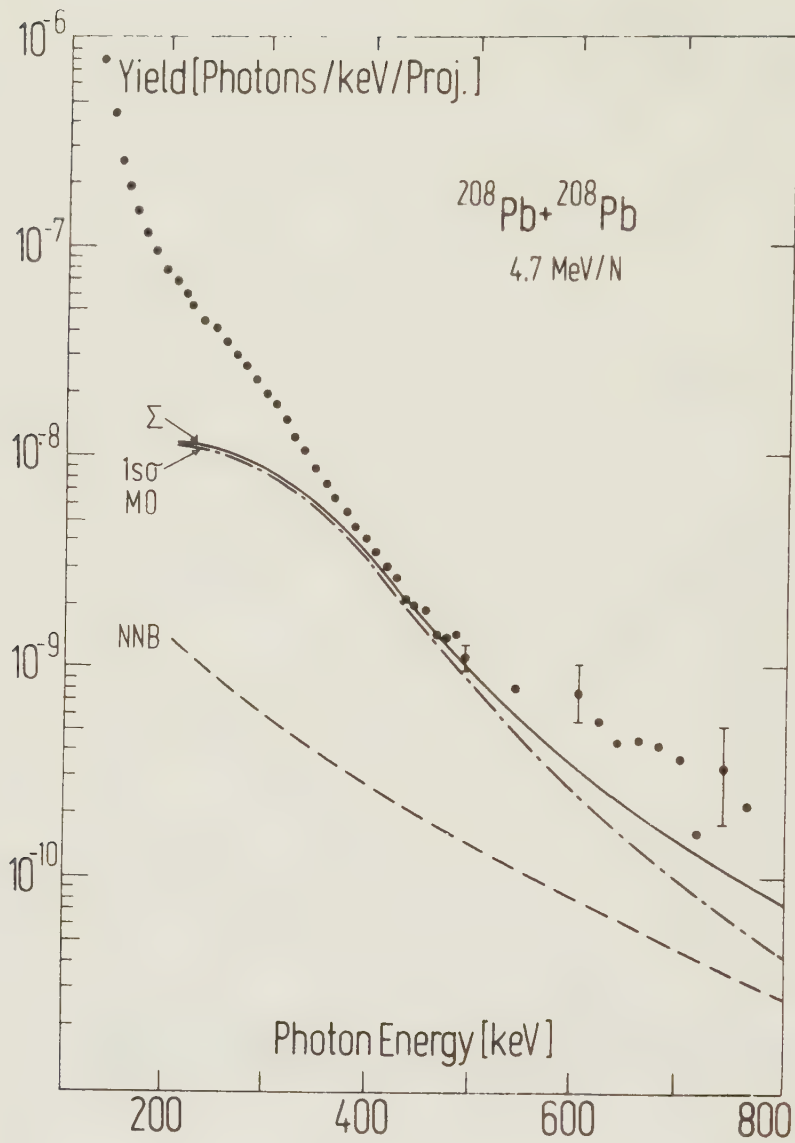
Figur 8:

Der differentielle Querschnitt für MO - Strahlung (durchgezogen) und NNB (gestrichelt) bei verschiedenen Stoßparametern als Funktion der Photonenenergie.



Figur 9:

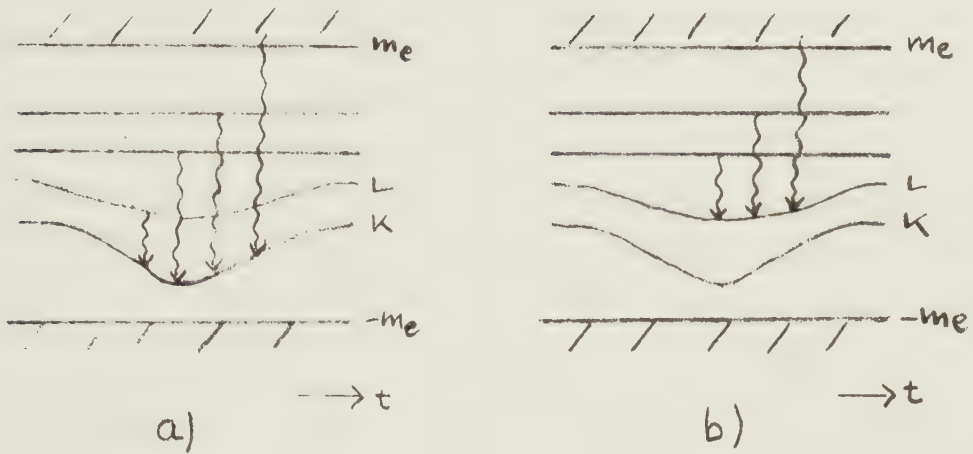
Der differentielle Strahlungsquerschnitt als Funktion des Stoßparameters für bestimmte Photonenenergien (Notation wie in Fig. 7).



Figur 10:

Die Photonenausbeute in Abhängigkeit von der Photonenenergie, gemessen von Meyerhof et al³³ in Vergleich zu den theoretischen Werten. Strichpunktiert dargestellt ist die K - MO - Röntgenstrahlung, gestrichelt die Kern - Kern - Bremsstrahlung und durchgezogen die Summe aus beiden.

ist ein Beitrag der L - Strahlung zum Spektrum in diesem Bereich zu erwarten.



2.3 Zur Anwendbarkeit der Standard - Beschreibung

Trotz guter Übereinstimmung mit dem Experiment sind unsere Resultate doch mit großen Unsicherheiten behaftet. Ursache dafür sind zwei Näherungen: erstens der Grenzfall langer Wellenlängen (2.21), der später noch diskutiert wird, und zweitens die Behandlung der Ionisation. Durch den Trick, die Anregung ins Kontinuum störungstheoretisch zu berechnen und für die gekoppelten gebundenen s - Zustände nur ein Loch zuzulassen, konnte die K - Ionisation relativ einfach bestimmt werden. Neuere Rechnungen³⁴ zeigen aber, daß Vielstufenprozesse wie Anregungen vom $1s\epsilon$ - in den $2s\epsilon$ - Zustand und dann ins Kontinuum die Ionisation der K - Schale bis zu einem Faktor 5 verändern können. Mit anderen Worten muß das Kontinuum in das System gekoppelter Kanäle miteinbezogen werden. Unrealistisch ist auch die Annahme voll besetzter p - Niveaus der L - und M - Schale während des ganzen Stoßprozesses. Kopplungen an höhere p - Zustände, insbesondere an die p - Kontinua, können zu einer drastischen

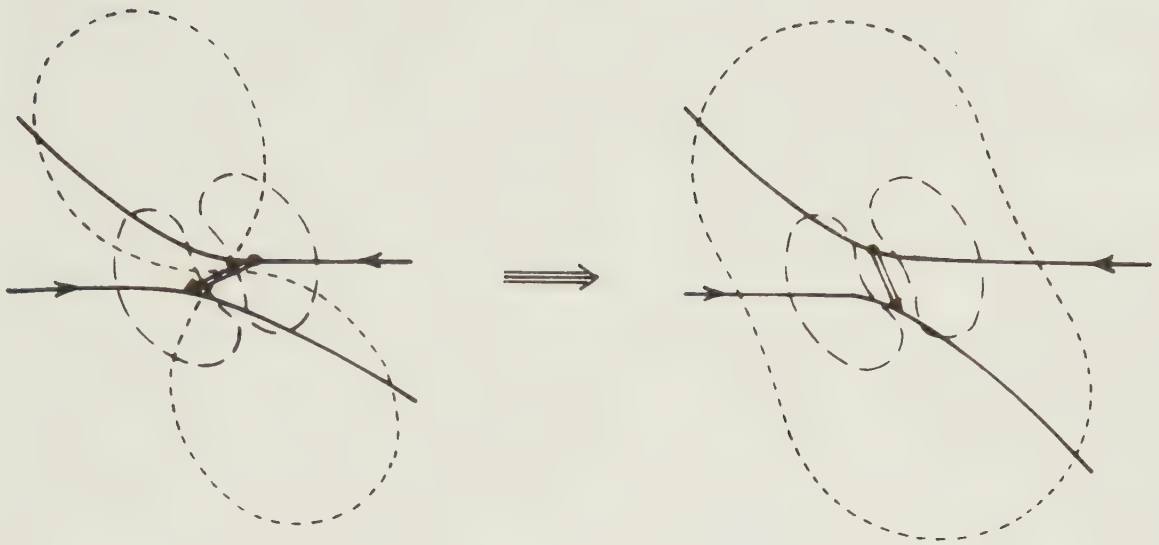
Reduzierung der Querschnitte führen. Ganz unübersichtlich wird die Situation, wenn man zu asymmetrischen Systemen übergeht und die Rotationskopplung miteinbezieht. In diesem Fall koppelt praktisch jeder Zustand mit jedem. Wir wollen das am Beispiel der Anisotropie (1.1) verdeutlichen, erläutern aber zuerst, warum die Rotationskopplung für die Anisotropie eine so wichtige Rolle spielt.

Wie erwähnt, wird η bei der K_{α} - Linie des vereinigten Systems maximal. Ursache ist vermutlich die starke Rotationskopplung der p - Zustände am Umkehrpunkt der Hyperbel. Dort können die Elektronen der schnellen Drehung der internuklearen Achse nicht folgen, d.h. die Eigenzustände weichen in ihrer Winkelabhängigkeit extrem von den adiabatischen Zuständen ab. Entsprechend groß sind die Kopplungen in der adiabatischen Basis. Figur 11 veranschaulicht das für den $2p\sigma$ - und $2p\pi$ - Zustand eines nichtrelativistischen Systems: die Verbindungsachse der Kerne dreht sich unter dem Elektronenorbital weg, so daß aus einem $2p\sigma$ - ein $2p\pi$ - Zustand wird und umgekehrt (sogenannte "slippage")¹⁷.

Es erhebt sich nun die Frage, wie man die vielfältigen Anregungsprozesse in den Konfigurationsformalismus einbauen kann. Formal ist das natürlich leicht möglich, doch schon ein einfaches Modell zeigt die praktischen Schwierigkeiten: Wenn wir das System auf die K-, L- und M - Schale (ohne d - Niveaus!) beschränken und annehmen, daß die K- und L - Schale vor dem Stoß voll sind und die M - Schale leer ist, haben wir mit 18 Einteilchen - Basiszuständen und 10 Elektronen zu arbeiten. Das bedeutet aber, daß nach Gleichung (2.9) ein System von

$$\binom{18}{10} = 43758$$

gekoppelten Kanälen bei ebensoviel Randbedingungen zu lösen ist, und außerdem, nach Gl. (2.14) genauso viele Zeitintegrale zu bestimmen sind. Beides sind Aufgaben, die nicht mit einem vertretbaren Aufwand bewältigt werden können. An eine Erweiterung dieses "K L M - Modells" durch Hinzunahme



UFFmTP 80-044

Figur 11:

Darstellung einer Kollision, wobei sich das Elektron anfangs im $2s\sigma$ - Zustand befindet. Im Umkehrbereich der Trajektorie dreht sich die Verbindungsachse der Kerne unter der Elektronenwolke (gestrichelte Kurve) weg, so daß sich das Elektron nach dem Stoß im $2p\pi$ - Zustand befindet. Das jeweils zugehörige Strahlungsfeld ist durch die gepunktete Kurve angedeutet.

höherer gebundener Niveaus oder des Kontinuums ist überhaupt nicht zu denken.

Im nächsten Kapitel stellen wir eine Formulierung vor, die alle diese Schwierigkeiten umgeht, indem sie den Begriff der Konfiguration vermeidet. Die Summation im Querschnitt (2.15) über alle Konfigurationen zeigt, daß man nur an sehr wenig spezifizierten Endzuständen interessiert ist, nämlich an der Intensität der emittierten Photonen ($\vec{k}, \lambda$) und nicht an der Verteilung der Elektronen.

3. Quantenfeldtheoretischer Formalismus

3.1 Lagrangedichte und Feldgleichungen

Ausgangspunkt der Beschreibung des Schwerionenstoßes im Heisenberg - Bild durch Feldoperatoren ist die Lagrangedichte des Gesamtsystems

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{L}} = \hat{\mathcal{L}}_N + \bar{\hat{\Phi}}_e (i\gamma^\mu \partial_\mu - m_e) \hat{\Phi}_e + \frac{1}{2} (\partial_\mu \hat{A}_\nu) (\partial^\mu \hat{A}^\nu) + \\ + \frac{1}{2} \{ \hat{j}_\mu^e, \hat{A}^\mu \} + (\hat{j}_\mu^1 + \hat{j}_\mu^2) \hat{A}^\mu \end{aligned} \quad (3.1)$$

wobei $\hat{\Phi}_e$ und $\hat{A}_\mu$ die Operatoren des Elektronen- bzw. elektromagnetischen Feldes und $\hat{j}_\mu^e, \hat{j}_\mu^1, \hat{j}_\mu^2$ die Ströme der Elektronen und der beiden Kerne sind. Die Antisymmetrisierung des elektronischen Stromoperators:

$$\hat{j}_\mu^e = -\frac{e}{2} [\bar{\hat{\Phi}}_e, \gamma_\mu \hat{\Phi}_e] \quad (3.2)$$

sowie die Symmetrisierung der Wechselwirkung stellen die Ladungsneutralität des Vakuums sicher³⁵. Da wir nur Stöße unterhalb der Coulomb - Barriere betrachten wollen, können wir die Kerne als elementare Teilchen auffassen. Die zugehörigen Feldoperatoren $\hat{\Phi}_K^*, \hat{\Phi}_K$, $K = 1, 2$, erzeugen bzw. vernichten dann Kerne mit der Masse M_K und der Ladung Z_K . Wenn wir ferner den Kernspin vernachlässigen, der verglichen mit dem Drehimpuls der Bewegung sehr klein ist, und die Bewegung selbst nichtrelativistisch beschreiben, erhalten wir für $\hat{\mathcal{L}}_N$, die Lagrangedichte der beiden Kerne:

$$\hat{\mathcal{L}}_N = \sum_{K=1,2} \hat{\Phi}_K^* i \partial_t \hat{\Phi}_K - \frac{1}{2M_K} (\vec{\nabla} \hat{\Phi}_K^*) \cdot (\vec{\nabla} \hat{\Phi}_K) \quad (3.3)$$

woraus bei minimaler Kopplung die Ströme folgen:

$$\begin{aligned} \hat{j}_\mu^K = Z_K e \left(\hat{\Phi}_K^* \hat{\Phi}_K, \frac{i}{2M_K} [\hat{\Phi}_K \vec{\nabla} \hat{\Phi}_K^* - \hat{\Phi}_K^* \vec{\nabla} \hat{\Phi}_K] - \right. \\ \left. - \frac{Z_K e}{M_K} \hat{A} \hat{\Phi}_K^* \hat{\Phi}_K \right) \end{aligned} \quad (3.3a)$$

Durch Variation der Wirkung $\int d^4k \hat{\mathcal{L}}$ ergeben sich die Feldgleichungen:

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu - m_e) \hat{\Phi}_e = \frac{e}{2} \{ \gamma_\mu \hat{\Phi}_e, \hat{A}^\mu \} \quad (3.4)$$

$$\left[\frac{1}{2m_k} (-i\vec{\nabla} - z_k e \hat{\mathbf{A}})^2 + z_k e \hat{A}_0 \right] \hat{\Phi}_k = i \partial_t \hat{\Phi}_k \quad (3.5)$$

$$\square \hat{A}_\mu = \hat{j}_\mu^e + \hat{j}_\mu^1 + \hat{j}_\mu^2 \quad (3.6)$$

Zunächst betrachten wir die Lösung der letzten Gleichung (3.6), die formal gegeben ist durch

$$\hat{A}_\mu = \hat{A}_\mu^{(+)} + \hat{A}_\mu^e + \hat{A}_\mu^1 + \hat{A}_\mu^2 \quad (3.7)$$

mit

$$\square \hat{A}_\mu^{(+)}(x) = 0 \quad (3.7a)$$

$$\hat{A}_\mu^e(x) = \int d^4y D^{\text{Ret}}(x-y) \hat{j}_\mu^e(y) \quad (3.7b)$$

$$\hat{A}_\mu^k(x) = \int d^4y D^{\text{Ret}}(x-y) \hat{j}_\mu^k(y) \quad , k=1,2 \quad (3.7c)$$

wobei $D^{\text{Ret}}(x-y)$ der retardierte Photonenpropagator ist.

$\hat{A}_\mu^{(+)}(x)$ ist das freie Photonen - In - Feld, $\hat{A}_\mu^e(x)$, $\hat{A}_\mu^k(x)$ sind die durch die Elektronen bzw. Kerne erzeugten Felder.

Um die Existenz der Integrale (3.7b,c) zu sichern, müssen die Ströme modifiziert werden, beispielsweise durch adiabatisches An- und Ausschalten. Dies erreicht man durch die Substitution³⁶

$$\hat{j}_\mu \rightarrow \hat{j}_\mu e^{-\alpha|t|} \quad , \alpha > 0 \quad (3.8)$$

wobei nach Abschluß aller Rechnungen der Grenzwert $\alpha \rightarrow 0$ zu bilden ist.

Zur Lösung der ersten beiden Feldgleichungen (3.4), (3.5) vernachlässigen wir die Rückwirkung der Elektronen auf den Kernstrom, was für schwere Systeme erlaubt ist, sowie die Selbstwechselwirkung eines jeden Kernes und seine Wechselwirkung mit dem freien Strahlungsfeld. Auf diese Weise

können wir die Kernbewegung unabhängig vom elektronischen System behandeln und erhalten:

$$\left[\frac{1}{2M_1} (-i\vec{\nabla} - z_1 e \vec{A}_2)^2 + z_1 e A_2^0 \right] \hat{\Phi}_1 = i \partial_t \hat{\Phi}_1 \quad (3.9)$$

und eine entsprechende Gleichung mit ausgetauschten Indizes 1,2.

Üblicherweise ersetzt man (3.9) durch sein klassisches Analogon, d.h. man nimmt an, daß sich die Kerne entlang klassischer Trajektorien bewegen (Gl. (2.23)). Die Elektronen werden dann durch die folgenden Kernstromdichten beeinflusst:

$$j_{\mu}^k = z_k e \int (\vec{x} - \vec{R}_k(t)) (1, \vec{v}_k) \quad (3.9a)$$

3.2 Lösung der Gleichung für das Elektronenfeld

Die Vernachlässigung des In - Feldes $\hat{A}_{\mu}^{(i)}$ in (3.4) entspricht der Annahme, daß kein äußeres Strahlungsfeld auf das System einwirkt. Ferner bleiben die Nullpunktsschwankungen des elektromagnetischen Feldes unberücksichtigt, die z.B. für den größten Teil der Lamb-Shift verantwortlich sind. Die Feldgleichung für $\hat{\Phi}_e$ hat dann die Form

$$\hat{d} \hat{\Phi}_e = -\frac{e}{2} \{ \gamma^{\mu} \hat{\Phi}_e, \hat{A}_{\mu}^e \} \quad (3.10)$$

mit der Abkürzung

$$\hat{d} \equiv i \gamma^{\mu} [\partial_{\mu} + i e (A_{\mu}^1 + A_{\mu}^2)] - m_e \quad (3.10a)$$

Um (3.10) zu lösen, benutzen wir die Fock - Darstellung des Feldoperators $\hat{\Phi}_e$:

$$\hat{\Phi}_e(x) = \sum_n \hat{a}_n(t) \psi_n(x) \quad (3.11)$$

$\{\psi_n(x)\}$ ist dabei ein vollständiger Satz orthonormierter Einteilchen - Wellenfunktionen, der noch zu spezifizieren ist. Aus der Kommutator - Beziehung

$$\{\hat{\phi}_e^+(x), \hat{\phi}_e(x')\}_{t=t'} = \delta(\vec{x} - \vec{x}')$$

folgt unmittelbar

$$\{a_n^+(t), a_m(t)\} = \delta_{nm} \quad (3.11a)$$

Unter der Annahme, daß für $t \rightarrow -\infty$ die Funktionen ψ_n in die elektronischen Eigenzustände des Systems übergehen, kann der Grundzustand durch Definition einer Fermi - Fläche derart definiert werden, daß

$$\hat{a}_n |F\rangle = 0 \quad n > F \quad (3.12)$$

$$\hat{a}_n^+ |F\rangle = 0 \quad n < F$$

wobei

$$\hat{a}_n = \lim_{t \rightarrow -\infty} \hat{a}_n(t) \quad (3.12a)$$

Der Grenzprozeß in (3.12a) wird durch den formalen Trick in (3.8) gerechtfertigt. Aus demselben Grund kann $|F\rangle$ als Slater - Determinante angenommen werden. Zu bemerken ist auch, daß wir es in einem realistischen System mit einem Ensemble verschieden vorionisierter Atome zu tun haben, so daß eine Beschreibung mit Hilfe der Dichtematrix erforderlich wird. Der Erwartungswert irgendeines Operators $\hat{O}$ ist dann gegeben durch:

$$\langle \hat{O} \rangle = \sum_F w_F \langle F | \hat{O} | F \rangle$$

wobei w_F das statistische Gewicht eines reinen Zustands $|F\rangle$ ist.

Gleichung (3.12) legt die Randbedingung des elektronischen Systems vollständig fest. Wir setzen nun die Entwicklung

(3.11) in (3.10) ein und erhalten bei Verwendung von (3.7b) und (3.2):

$$\begin{aligned} \sum_n i\gamma_0 \psi_n(x) \dot{\hat{a}}_n(t_x) + (\hat{d}\psi_n(x)) \hat{a}_n(t_x) = \\ = -\frac{1}{4} e^2 \gamma^\mu \int d^4y D^{\text{Ret}}(x-y) \sum_{emh} \bar{\psi}_e(y) \gamma_\mu \psi_m(y) \psi_n(x) \times \\ \times \left[\hat{a}_n(t_x) \hat{a}_e^\dagger(t_y) \hat{a}_m(t_y) - \hat{a}_n(t_x) \hat{a}_m(t_y) \hat{a}_e^\dagger(t_y) + \right. \\ \left. + \hat{a}_e^\dagger(t_y) \hat{a}_m(t_y) \hat{a}_n(t_x) - \hat{a}_m(t_y) \hat{a}_e^\dagger(t_y) \hat{a}_n(t_x) \right] \end{aligned} \quad (3.13)$$

Bis jetzt haben wir die Basis $\{\psi_n\}$ noch nicht spezifiziert, was auf mehrere Arten geschehen kann. Z.B. erhält man die zeitabhängigen Hartree - Fock - Gleichungen, wenn man die Zeitabhängigkeit der Operatoren $\hat{a}_n$ vernachlässigt, d.h.

$\hat{a}_n(t) = \hat{a}_n$ setzt, und außerdem fordert, daß (3.13) für alle Matrixelemente zwischen Zuständen, die sich nur durch ein angeregtes Teilchen unterscheiden, exakt ist:

$$\begin{aligned} \hat{d}\psi_n(x) = -\frac{e^2}{4} \gamma^\mu \int d^4y D^{\text{Ret}}(x-y) \times \\ \times \sum_m \left(\bar{\psi}_m(y) \gamma_\mu \psi_m(y) \psi_n(x) - \bar{\psi}_m(y) \gamma_\mu \psi_m(x) \psi_n(y) \right) \end{aligned} \quad (3.14)$$

mit

$$\sum_m \equiv \frac{1}{2} \left(\sum_{m < F} - \sum_{m > F} \right) \quad (3.14a)$$

Die Tilde - Summe (3.14a) hat definitionsgemäß die folgende Eigenschaft:

$$\sum_m \equiv \sum_{F_0 < m < F} + \frac{1}{2} \left(\sum_{m < F_0} - \sum_{m > F_0} \right) \equiv \sum_m^{+F} + \sum_m^{u_h} \quad (3.14b)$$

wobei F_0 die Fermikante eines Systems zweier voll ionisierter Atome ist. $\sum_m^{+F}$ ist also die Summe über alle real besetzten Zustände, während der Rest, die Ühling - Summe $\sum_m^{u_h}$, die Effekte der Vakuum - Polarisation beschreibt.

Eine andere Basis $\{\psi_n\}$ liefern die Lösungen von

$$\hat{d}\psi_n = 0 \quad (3.15)$$

Die verbleibende Zeitabhängigkeit der $\hat{a}_n^{(1)}$ s ist ziemlich kompliziert und kann nicht exakt bestimmt werden, da man mit (3.15) auf ein nichtlineares Gleichungssystem geführt wird, das aber störungstheoretisch behandelt werden kann. In erster Ordnung z.B. erhält man

$$\hat{a}_k^{(1)}(t) = \hat{a}_k^{(0)} - \frac{ie^2}{2} \gamma_0 \gamma^\mu \int d^4y \sum_{lmn} \bar{\Psi}_l(y) \gamma_\mu \Psi_m(y) \times \quad (3.16)$$

$$\times \int_{-\infty}^t d\tau \langle \Psi_k(x) | D^{\text{ret}}(x-y) | \Psi_n(x) \rangle (2\hat{a}_2^{(0)\dagger} a_m^{(0)} a_n^{(0)} + \delta_{en} \hat{a}_m^{(0)} - \delta_{em} \hat{a}_n^{(0)})$$

Die Lösungen nullter Ordnung, $\hat{a}_n^{(0)}$, sind hierbei identisch mit den $\hat{a}_n$ s in (3.12), die den Grundzustand definieren.

Im folgenden werden wir mit der Basis (3.15) arbeiten und die Elektron-Elektron-Wechselwirkung vernachlässigen, da wir hauptsächlich am Verhalten der inneren Schalen interessiert sind (siehe auch Abschnitt (2.2), Näherung (b)). Als direkte Konsequenz sind die $\hat{a}_n$ s zeitunabhängig. Da $\hat{d}$ ein selbstadjungierter Operator ist, bilden die Lösungen von (3.15) für alle Zeiten eine Orthonormalbasis, wenn dies auch für $t \rightarrow -\infty$ der Fall war. Wir beweisen das für die Orthogonalitätsrelation $\langle \Psi_n(t) | \Psi_m(t) \rangle = \delta_{nm}$, indem wir zeigen, daß sie zeitinvariant ist, d.h.

$$\partial_t \langle \Psi_n | \Psi_m \rangle = 0$$

Dazu zerlegen wir $\hat{d}$ in

$$\hat{d} = \hat{d}_0 - i\gamma_0 \partial_t$$

Es gilt dann

$$\begin{aligned} i\partial_t \langle \Psi_n | \Psi_m \rangle &= i \langle \partial_t \Psi_n | \Psi_m \rangle + i \langle \Psi_n | \partial_t \Psi_m \rangle \\ &= - \langle i\partial_t \Psi_n | \Psi_m \rangle + \langle \Psi_n | i\partial_t \Psi_m \rangle \\ &= - \langle \gamma_0 \hat{d}_0 \Psi_n | \Psi_m \rangle + \langle \Psi_n | \gamma_0 \hat{d}_0 \Psi_m \rangle \\ &= 0 \end{aligned}$$

weil auch $\hat{d}_0$ selbstadjungiert ist.

Die Ψ_n 's erhält man, indem man zunächst die stationäre Zweizentren - Dirac - Gleichung löst:

$$\gamma^0 [\vec{\gamma} \cdot \vec{p} + m_e + \gamma^0 V_{\pi}(\vec{r}, R(t))] \varphi_n(\vec{r}, R(t)) = \omega_n(R(t)) \varphi_n(\vec{r}, R(t)) \quad (3.17)$$

wobei V_{π} , das Zweizentren - Coulomb - Potential, durch (2.18) gegeben ist. Die Entwicklung der Ψ_n 's in die Lösungen von (3.17):

$$\Psi_n^{(\pm)}(\vec{r}, t) = \sum_e b_{ne}^{(\pm)}(t) \varphi_e(\vec{r}, R(t)) e^{-i \int^t dt' \omega_e} \quad (3.18)$$

wird nun in (3.15) eingesetzt. Durch Projektion zu jedem Zeitpunkt auf die Basis φ_n erhalten wir ein System gekoppelter Differentialgleichungen für die Einteilchenbesetzungsamplituden:

$$\dot{b}_{ne}^{(\pm)}(t) = - \sum_{e'} b_{ne'}^{(\pm)}(t) e^{i \int^t dt' (\omega_e - \omega_{e'})} \langle \varphi_e | \hat{Q} - i e \gamma^0 \vec{\gamma} \cdot (\vec{A}^1 + \vec{A}^2) | \varphi_{e'} \rangle \quad (3.19)$$

Analog dem Fall der Konfigurationsamplituden $a_{nm}^{(\pm)}$ (siehe Gleichung (2.9) - (2.11)) existieren wieder die beiden Randbedingungen:

$$\lim_{t \rightarrow \mp \infty} b_{ne}^{(\pm)}(t) = \delta_{ne} \quad (3.20)$$

Entsprechend sind auch die Operatoren $\hat{a}_n^{(\pm)}$, die nicht mit den Amplituden $a_{nm}^{(\pm)}$ zu verwechseln sind, zu kennzeichnen. Ebenfalls wie in Gl. (2.9) sind wegen der Translation der Elektronen die Kopplungsmatrixelemente in (3.19) zu modifizieren.

3.3 Locherzeugungsraten

Als erste Anwendung der Theorie wollen wir jetzt die Endwahrscheinlichkeit für ein Loch im Zustand k mit $k < F$ berechnen. Durch Gleichsetzen der beiden Fock - Entwicklungen (3.11), (3.18):

$$\sum_n \hat{a}_n^{(+)} \Psi_n^{(+)} = \hat{\Phi}_e = \sum_n \hat{a}_n^{(-)} \Psi_n^{(-)}$$

erhalten wir einen Zusammenhang zwischen den entsprechenden Teilchenoperatoren:

$$\hat{a}_n^{(-)} = \sum_m \hat{a}_m^{(+)} \langle \Psi_n^{(-)} | \Psi_m^{(+)} \rangle$$

Das S - Matrixelement $\langle \Psi_n^{(-)} | \Psi_m^{(+)} \rangle$ ist zeitunabhängig und kann durch die Besetzungsamplituden ausgedrückt werden. Um das zu zeigen, verwenden wir den Zeitentwicklungsoperator, der die Gleichung

$$\hat{d}_t \mathcal{U}(t, t') = 0$$

erfüllt. Es gilt dann

$$\begin{aligned} \langle \Psi_n^{(-)}(t) | \Psi_m^{(+)}(t) \rangle &= \lim_{\tau \rightarrow \infty} \langle \varphi_n(\tau) e^{-i \int_{\tau}^t d\tau' \mathcal{H}_n} | \mathcal{U}^+(t, \tau) \Psi_m^{(+)}(\tau) \rangle \\ &= \lim_{\tau \rightarrow \infty} \langle \varphi_n(\tau) e^{-i \int_{\tau}^t d\tau' \mathcal{H}_n} | \Psi_m^{(+)}(\tau) \rangle \\ &= b_{mn}^{(+)}(\infty) \end{aligned}$$

Die Ersetzung der tatsächlich auslaufenden Welle durch die stationäre Lösung

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \Psi_n^{(-)}(t) = \lim_{t \rightarrow \infty} \varphi_n(t)$$

wird durch die adiabatische Hypothese, Gleichung (3.8), gerechtfertigt. Diese stellt zwar eine Idealisierung dar, weil die statischen, elektronischen Kopplungen asymptotisch nicht verschwinden. In der Näherung unabhängiger Teilchen wird jedoch die Elektron - Elektron - Wechselwirkung vernachlässigt. Wir dürfen also schreiben:

$$\hat{a}_n^{(-)} = \sum_m \hat{a}_m^{(+)} b_{mn}^{(+)}(\infty) \quad (3.21)$$

Die Loch - Endwahrscheinlichkeit im Zustand φ_k ist gegeben durch

$$P_k = 1 - \langle F | \hat{a}_k^{(-)} + \hat{a}_k^{(+)} | F \rangle$$

wobei der Grundzustandserwartungswert mit Hilfe von (3.21) ausgewertet werden kann, so daß wir schließlich erhalten

$$P_K = \sum_{m>F} |b_{mK}^{(+)}(\infty)|^2 \quad (3.22)$$

Für den Fall, daß $\hat{a}_m^{(+)}$ von der Zeit abhängt, muß alles durch $\hat{a}_m^{(+)}(-\infty) \equiv \hat{a}_m$ (Gleichung (3.16)) ausgedrückt werden.

3.4 Das Strahlungsfeld

Zu der Berechnung der Strahlung fassen wir die wichtigsten Gleichungen noch einmal zusammen, wobei wir gleichzeitig die elementaren Näherungen (Entkopplung des Kern - Kern - Systems und des elektronischen Systems durch die semiklassische Näherung (3.9a), Vernachlässigung der Elektron - Elektron - Wechselwirkung) miteinbeziehen:

$$\square \hat{A}_\mu(x) = \hat{j}_\mu(x) = -\frac{e}{2} [\bar{\hat{\Phi}}(x), \gamma_\mu \hat{\Phi}(x)] \quad (3.23)$$

$$\hat{\Phi}(x) = \sum_n \hat{a}_n \psi_n(x) \quad (3.24)$$

$$\hat{d} \psi_n(x) = 0 \quad (3.25)$$

Der Einfachheit halber haben wir den Index e für elektronische Operatoren weggelassen. Ferner haben wir in (3.24), (3.25) die Randbedingung nicht festgelegt, nehmen aber im folgenden an, es handele sich um den (+) - Typ, definiert in (3.20).

Die formale Lösung von (3.23) stellt eine Superposition des freien In - Feldes mit dem durch die Elektronen erzeugten Feld dar (Gl. (3.7a,b)):

$$\hat{A}_\mu(x) = \hat{A}_\mu^{(+)}(x) + \int d^4y D^{\text{Ret}}(x-y) \hat{j}_\mu(y)$$

Sie umschließt die Randbedingung

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} \hat{A}_\mu(x) = \lim_{t \rightarrow -\infty} \hat{A}_\mu^{(+)}(x) \quad (3.26a)$$

weil der retardierte Propagator im unteren Lichtkegel (Vergangenheit) verschwindet. Da wir an der Strahlung nach dem Stoß interessiert sind, definieren wir ein Out - Feld durch

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \hat{A}_\mu^{(-)}(x) = \lim_{t \rightarrow +\infty} \hat{A}_\mu(x) \quad (3.26b)$$

und erhalten die Darstellung des Strahlungsfeldes durch das Out - Feld und den avancierten Propagator $D^{\text{adv}}(x-y)$:

$$\hat{A}_\mu(x) = \hat{A}_\mu^{(-)}(x) + \int d^4y D^{\text{adv}}(x-y) \hat{j}_\mu(y)$$

Durch Gleichsetzen der beiden Ausdrücke für $\hat{A}_\mu$ und unter Verwendung des Zusammenhangs von retardiertem und avanciertem Propagator

$$D^{\text{ret}}(x-y) = D^{\text{adv}}(x-y) - \Delta_0(x-y)$$

wobei Δ_0 Schwinger's Deltafunktion ist, folgt eine Beziehung zwischen dem In- und dem Out - Feld:

$$\hat{A}_\mu^{(-)}(x) = \hat{A}_\mu^{(+)}(x) - \int d^4y \Delta_0(x-y) \hat{j}_\mu(y) \quad (3.27)$$

Wegen $\square_x \Delta_0(x-y) = 0$ erfüllt auch $\hat{A}_\mu^{(-)}(x)$ die freie Maxwell - Gleichung. Die asymptotischen Felder $\hat{A}_\mu^{(\pm)}(x)$ können daher in der üblichen Weise quantisiert werden (siehe Gl. (2.2)):

$$\hat{A}_\mu^{(\pm)}(x) = \sum_{\vec{k}, \lambda} \hat{a}_{\vec{k}, \lambda}^{(\pm)} q_{\vec{k}, \lambda \mu}(x) + \hat{a}_{\vec{k}, \lambda}^{(\pm)\dagger} q_{\vec{k}, \lambda \mu}^*(x) \quad (3.28)$$

mit

$$[\hat{a}_{\vec{k}, \lambda}^{(\pm)\dagger}, \hat{a}_{\vec{k}', \lambda'}^{(\pm)}] = \delta_{\vec{k} \vec{k}'} \delta_{\lambda \lambda'} \quad (3.29)$$

und

$$q_{\vec{k}\lambda\mu}(x) = \frac{1}{(\sqrt{2\omega_k})^{1/2}} \epsilon_{\vec{k}\lambda\mu} e^{-ikx} = : \epsilon_{\vec{k}\lambda\mu} f_{\vec{k}}(x) \quad (3.30)$$

λ bezeichnet die Polarisation, μ ist der Vierervektorindex, $\omega_k = |\vec{k}|$. Die Orthogonalitätsrelationen der Basisfunktionen $q_{\vec{k}\lambda\mu}(x)$ erhält man aus

$$\begin{aligned} i \int_V d^3x f_{\vec{k}'}^*(x) \overleftrightarrow{\partial}_0 f_{\vec{k}}(x) &= \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \\ i \int_V d^3x f_{\vec{k}}(x) \overleftrightarrow{\partial}_0 f_{\vec{k}}(x) &= 0 \end{aligned} \quad (3.31a,b)$$

und

$$\epsilon_{\vec{k}\lambda'\mu} \epsilon_{\vec{k}\lambda}^\mu = \delta_{\lambda\lambda'} \quad (3.31c)$$

wobei die Abkürzung

$$A \overleftrightarrow{\partial}_0 B \equiv A (\partial_0 B) - (\partial_0 A) B$$

verwendet wurde. Aus (3.27) können wir jetzt durch Projektion auf die Basis (3.30) mit Hilfe von (3.31) eine Beziehung zwischen In- und Out - Operatoren ableiten:

$$\hat{d}_{\vec{k}\lambda}^{(-)} = \hat{d}_{\vec{k}\lambda}^{(+)} - i \hat{h}_{\vec{k}\lambda} \quad (3.32)$$

mit

$$\hat{h}_{\vec{k}\lambda} = \int_V d^3x q_{\vec{k}\lambda\mu}^* \overleftrightarrow{\partial}_0 \int d^4y \Delta_0(x-y) \hat{f}^\mu(y) \quad (3.32a)$$

Um (3.32a) zu vereinfachen, benutzen wir die Darstellung von Δ_0 durch die Funktionen $f_{\vec{k}}$:

$$\Delta_0(x-y) = -i \sum_{\vec{k}'} [f_{\vec{k}'}^*(x) f_{\vec{k}'}(y) - f_{\vec{k}'}(x) f_{\vec{k}'}^*(y)]$$

Es folgt:

$$\hat{h}_{\vec{k}\lambda} = \int d^4y \varepsilon_{\vec{k}\lambda\mu} \hat{g}^\mu(y) \times$$

$$\times (-i) \sum_{\vec{k}'} \int_V d^3x f_{\vec{k}}^*(x) \overleftrightarrow{\partial}_0 [f_{\vec{k}'}^*(x) f_{\vec{k}'}(y) - f_{\vec{k}'}(x) f_{\vec{k}'}^*(y)]$$

und mit (3.31a,b) erhalten wir

$$\hat{h}_{\vec{k}\lambda} = \int d^4x q_{\vec{k}\lambda\mu}^*(x) \hat{g}^\mu(x) \quad (3.33)$$

Mit (3.2) und (3.24) gilt dann:

$$\hat{h}_{\vec{k}\lambda} = -\frac{e}{2} \int d^4x q_{\vec{k}\lambda\mu}^*(x) \sum_{n,m} \bar{\Psi}_n(x) \gamma^\mu \Psi_m(x) (\hat{a}_n^+ \hat{a}_m - \hat{a}_m \hat{a}_n^+)$$

Definieren wir

$$H_{\vec{k}\lambda}^{nm} \equiv -\frac{e}{(\sqrt{2\omega_k})^{1/2}} \int dt e^{i\omega t} \langle \Psi_n | \varepsilon_{\vec{k}\lambda\mu}^* e^{-i\vec{k}\vec{x}} \gamma^\mu | \Psi_m \rangle \quad (3.34)$$

wobei das Skalarprodukt gegeben ist durch

$$\langle \Psi_n | A | \Psi_m \rangle = \int d^3x \bar{\Psi}_n(x) A \Psi_m(x)$$

so läßt sich $\hat{h}_{\vec{k}\lambda}$ schließlich schreiben als

$$\hat{h}_{\vec{k}\lambda} = \sum_{n,m} H_{\vec{k}\lambda}^{nm} \hat{a}_n^+ \hat{a}_m - \frac{1}{2} \sum_n H_{\vec{k}\lambda}^{nn} \quad (3.35)$$

3.5 Die Strahlungsintensität

Den differentiellen Streuquerschnitt (2.15) berechnen wir jetzt über die Strahlungsintensität $I(\vec{k},\lambda)$, d.h. die

Zahl der Photonen mit Impuls $\vec{k}$ und Polarisation λ :

$$\frac{d\epsilon}{d\Omega_N} = \left(\frac{d\epsilon}{d\Omega_N} \right)_{\text{Kuth}} \sum_{\lambda} I(\vec{k}, \lambda) \frac{V \omega^2 d\omega d\Omega_K}{(2\pi)^3} \quad (3.36)$$

Wir haben dabei die gleichen Symbole wie in Abschnitt (2.1) benutzt und werden auch hier das Normierungsvolumen nicht mehr explizit aufführen. Die Integration über die Winkel Ω_N, Ω_K führt zu den entsprechenden Formeln (2.16), (2.17). Lediglich $\sum_{\vec{k}, \lambda} |c_{\vec{k}, \lambda}^{(i)}|^2$ ist durch

$$I(\vec{k}, \lambda) = \sum_i |c_{\vec{k}, \lambda}^{(i)}|^2 \quad (3.37)$$

zu ersetzen. Die Intensität selbst ist der Erwartungswert des Photonenzahloperators im asymptotischen Bereich $t \rightarrow +\infty$:

$$I(\vec{k}, \lambda) = \langle F | \hat{d}_{\vec{k}, \lambda}^{(-)\dagger} \hat{d}_{\vec{k}, \lambda}^{(-)} | F \rangle \quad (3.38)$$

Zur Auswertung des Matrixelementes (3.38) muß der Grundzustand $|F\rangle$ auch bezüglich des Photonensystems definiert werden. Wie schon erwähnt wollen wir dazu die Randbedingung

$$\hat{d}_{\vec{k}, \lambda}^{(+)} | F \rangle = 0 \quad (3.39)$$

verwenden, also fordern, daß kein Photon vor dem Stoß existiert. Durch (3.39) sind wir aber gezwungen, die $(-)$ - Operatoren durch die $(+)$ - Operatoren auszudrücken, was mit (3.32) möglich ist. Es folgt unter Berücksichtigung von (3.39):

$$\begin{aligned} I(\vec{k}, \lambda) &= \langle F | (\hat{d}_{\vec{k}, \lambda}^{(+)\dagger} + i \hat{h}_{\vec{k}, \lambda}^{\dagger}) (\hat{d}_{\vec{k}, \lambda}^{(-)} - i \hat{h}_{\vec{k}, \lambda}) | F \rangle \\ &= \langle F | \hat{d}_{\vec{k}, \lambda}^{(+)\dagger} \hat{d}_{\vec{k}, \lambda}^{(-)} | F \rangle - i \langle F | \hat{d}_{\vec{k}, \lambda}^{(+)\dagger} \hat{h}_{\vec{k}, \lambda} | F \rangle + \\ &\quad + \langle F | \hat{h}_{\vec{k}, \lambda}^{\dagger} \hat{d}_{\vec{k}, \lambda}^{(-)} | F \rangle + \langle F | \hat{h}_{\vec{k}, \lambda}^{\dagger} \hat{h}_{\vec{k}, \lambda} | F \rangle \\ &= \langle F | \hat{h}_{\vec{k}, \lambda}^{\dagger} \hat{h}_{\vec{k}, \lambda} | F \rangle \quad (3.40) \end{aligned}$$

da wegen (3.39) auch $\langle F | \hat{d}_{k\lambda}^{(+)\dagger} = 0$ ist.

An Gleichung (3.37) kann man direkt den großen Vorteil der quantenfeldtheoretischen Formulierung erkennen. Die Formel (3.40) für die Intensität kommt ohne Konfigurationen aus, weil sie nur die gewünschte Information und nicht mehr enthält.

Bis jetzt haben wir noch nicht die Eichung des elektromagnetischen Feldes eindeutig festgelegt. Zur Herleitung von (3.23) muß sie der klassischen Bedingung

$$\partial_\mu A^\mu = 0$$

entsprechen, kann aber nicht in dieser Form verwendet werden, da das zu Inkonsistenzen führt. Die modifizierte Bedingung^{37,38}

$$(\partial_\mu \hat{A}^\mu)_{\text{pos.}} |F\rangle = 0$$

die nur den Teil positiver Frequenz von $(\partial_\mu A^\mu)$ einschließt, besitzt diesen Mangel nicht und hat den Vorteil, daß sich alle Beiträge longitudinaler ($\lambda=3$) und skalarer ($\lambda=0$) Photonen gegenseitig aufheben. Im Streuquerschnitt (3.36) ist daher nur über die transversalen Polarisationen ($\lambda=1,2$) zu summieren.

Wir setzen nun (3.35) in (3.40) ein

$$\begin{aligned} I(\vec{k}, \lambda) &= \sum_{\substack{n,m \\ i,j}} H_{k\lambda}^{ij*} H_{k\lambda}^{nm} \langle F | \hat{a}_j^+ \hat{a}_i \hat{a}_n^+ \hat{a}_m | F \rangle + \frac{1}{4} \sum_{j,n} H_{k\lambda}^{jj*} H_{k\lambda}^{nn} + \\ &+ \sum_{i,j} H_{k\lambda}^{ij*} \langle F | \hat{a}_j^+ \hat{a}_i | F \rangle \left(-\frac{1}{2} \sum_n H_{k\lambda}^{nn} \right) + \sum_{n,m} H_{k\lambda}^{nm} \langle F | \hat{a}_n^+ \hat{a}_m | F \rangle \left(-\frac{1}{2} \sum_j H_{k\lambda}^{jj*} \right) \end{aligned}$$

Die Matrixelemente mit zwei Operatoren

$$\langle F | \hat{a}_n^+ \hat{a}_m | F \rangle$$

existieren genau dann, wenn $n = m < F$ ist, die mit vier

$$\langle F | \hat{a}_j^+ \hat{a}_i \hat{a}_n^+ \hat{a}_m | F \rangle$$

wenn entweder $j = i$, $n = m$ und $i, m < F$ oder $j = m$, $i = n$ und $n > F$, $m < F$ gilt. Die Auswertung aller Matrixelemente führt daher zu

$$I(\vec{k}_1) = \sum_{\substack{n>F \\ m<F}} |H_{\vec{k}_1}^{nm}|^2 + \left| \sum_{\substack{m<F \\ n>F}} H_{\vec{k}_1}^{nm} \right|^2 - \frac{1}{2} \sum_n H_{\vec{k}_1}^{nn} \sum_{\substack{m<F \\ n>F}} H_{\vec{k}_1}^{nm} - \\ - \frac{1}{2} \sum_n H_{\vec{k}_1}^{nn*} \sum_{\substack{m<F \\ n>F}} H_{\vec{k}_1}^{nm} + \left| \frac{1}{2} \sum_n H_{\vec{k}_1}^{nn} \right|^2$$

Zerlegt man die Summe $\sum_{n<F}$ in

$$\sum_{n<F} = \sum_n^{+F} + \sum_{n<F_0}$$

und die Summe $-\frac{1}{2} \sum_n$ in

$$-\frac{1}{2} \sum_n = - \sum_{n<F_0} + \sum_n^{+F}$$

wobei die Notationen von Abschnitt (3.2) verwendet werden, so folgt schließlich

$$I(\vec{k}_1) = \sum_{\substack{n>F \\ m<F}} |H_{\vec{k}_1}^{nm}|^2 + \left[\left(\sum_{n<F_0} + \sum_n^{+F} \right) \left(\sum_{n<F_0} + \sum_n^{+F} \right) + \left(- \sum_{n<F_0} + \sum_n^{+F} \right) \left(\sum_{n<F_0} + \sum_n^{+F} \right) + \right. \\ \left. + \left(- \sum_{n<F_0} + \sum_n^{+F} \right) \left(\sum_{n<F_0} + \sum_n^{+F} \right) + \left(- \sum_{n<F_0} + \sum_n^{+F} \right) \left(- \sum_{n<F_0} + \sum_n^{+F} \right) \right] H_{\vec{k}_1}^{nn*} H_{\vec{k}_1}^{nn} \\ = \sum_{\substack{n>F \\ m<F}} |H_{\vec{k}_1}^{nm}|^2 + \left| \left(\sum_n^{+F} + \sum_{n<F_0} \right) H_{\vec{k}_1}^{nn} \right|^2 \\ = \sum_{\substack{n>F \\ m<F}} |H_{\vec{k}_1}^{nm}|^2 + \left| \sum_n H_{\vec{k}_1}^{nn} \right|^2 \quad (3.41)$$

Die Praktikabilität von (3.41) wird deutlich, wenn wir versuchen, basierend auf dem im letzten Kapitel besprochenen KLM - Modell die Anisotropie zu berechnen. Im Gegensatz zum Vielteilchen - S-Matrix - Formalismus ist jetzt nur ein System von 18 gekoppelten Differentialgleichungen (bei 18 Randbedingungen) zu lösen (vgl. (3.19) mit (2.9)). Auch die Zahl der Zeitintegrale (3.34) hält sich im Rahmen, da die

Summationsindizes in (3.41) nur über einen kleinen Bereich laufen.

Eine Erweiterung von (3.38) ermöglicht auch die Berechnung von Koinzidenz - Spektren, die man bei gleichzeitigem Beobachten von quasimolekularen Röntgenstrahlen und den charakteristischen K - Linien der einzelnen Atome erhält. Ein Strahlungsübergang vom $2p_{1/2}\epsilon$ - ins $1s\epsilon$ - Niveau z.B. erzeugt ein Loch im $2p_{1/2}\epsilon$ - Zustand, das in die K - Schale des leichteren Kollisionspartners transferiert wird, wo es unter Emission eines Photons zerfällt. Dieser Prozeß wird daher durch den Erwartungswert des Produktes der Teilchenzahloperatoren für quasimolekulare Photonen und K - Löcher im Endzustand beschrieben:

$$I(\vec{k}, \lambda, K) = \langle F | \hat{d}_{\vec{k}\lambda}^{(-)+} \hat{d}_{\vec{k}\lambda}^{(-)} \hat{a}_K^{(-)} \hat{a}_K^{(-)+} | F \rangle$$

Mit (3.21) und (3.32) ergibt sich daraus unter Vernachlässigung der Effekte der Vakuumpolarisation:

$$I(\vec{k}, \lambda, K) = \sum_{\substack{ijn \\ mst}} b_{sK}(\infty) b_{tK}^*(\infty) \#_{\vec{k}\lambda}^{ij*} \#_{\vec{k}\lambda}^{nm} \langle F | \hat{a}_j^+ \hat{a}_i \hat{a}_n^+ \hat{a}_m \hat{a}_s \hat{a}_t^+ | F \rangle \quad (3.42)$$

Die sechs Terme, die sich nach Auswertung des Matrixelementes in (3.42) ergeben, können leicht berechnet werden, wenn einmal $b_{ne}(\infty)$ und $\#_{\vec{k}\lambda}^{nm}$ bekannt sind.

Zum Schluß dieses Abschnitts weisen wir noch einmal ausdrücklich darauf hin, daß beide hier vorgestellten Methoden formal eine vollständige Beschreibung der Strahlungs- und Ionisationsvorgänge in Schwerionenstößen erlauben. Die feldtheoretische Einführung eignet sich jedoch in der Anwendung, bei konkreten Modellrechnungen also, besser, weil sie direkt auf die erwünschten formalen Ausdrücke führt. Im Anhang werden die Gleichungen (3.41), (3.34) auch im Konfigurationsformalismus abgeleitet, was weit aufwendiger als die Herleitung mit Hilfe von Feldoperatoren ist. Außerdem wurde die im Anhang dargestellte Entwicklung zum Endresultat (3.41) hin im Grunde nur möglich, weil dieses bereits aus der obigen Beschreibung bekannt war (was insbesondere für die Substitution $c_{\vec{k}\lambda}^{ti} \rightarrow \tilde{c}_{\vec{k}\lambda}^{ti}$ gilt, Gl. (A1) - (A4)).

3.6 Ein schematisches Modell

Im letzten Abschnitt des Kapitels untersuchen wir die Strahlungsformel (3.41) im Hinblick auf den zeitlichen Ablauf von Anregung und Strahlung. Zu diesem Zweck betrachten wir ein Einelektronen-Modell, das uns erlaubt, die Resultate beider Formalismen direkt miteinander zu vergleichen. Der Einfachheit halber lassen wir die Photonen - Quantenzahlen weg. Die Intensität kann dann auf zwei äquivalente Weisen ausgedrückt werden:

$$I = \sum_{n > F_0} |c_n|^2 = \sum_{n > F_0} |H_n|^2 \quad (3.43)$$

mit

$$c_n \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \sum_{e, e'} b_{ne}^{(-)*} b_{ne'}^{(+)} \langle \varphi_e | \vec{j} \cdot \vec{q}^* | \varphi_{e'} \rangle e^{i \int dt' (\omega_e - \omega_{e'})} \quad (3.43a, b)$$

$$H_n \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \sum_{e, e'} b_{ne}^{(+)*} b_{ne'}^{(+)} \langle \varphi_e | \vec{j} \cdot \vec{q}^* | \varphi_{e'} \rangle e^{i \int dt' (\omega_e - \omega_{e'})}$$

wobei $b_{ne}^{(\pm)}$ die Lösungen von (3.19) sind und auch in (3.43a) auftreten, da im Einteilchen - Modell $a_{ne}^{(\pm)}$ und $b_{ne}^{(\pm)}$ identisch sind. Weil $\vec{q}_{\lambda 0} = 0$ für transversale Photonen ist, stimmt (3.34) mit (3.43b) überein ($\vec{j} \equiv -e\vec{f}$). Fernerhin wurde das Elektron in den Grundzustand (1) gesetzt. Natürlich enthält das "Einteilchen" - Modell noch den voll besetzten Dirac - See (Fermikante F_0), dessen Einfluß wir aber, ebenso wie den des Ühling - Terms (Gl. (3.41)), vernachlässigen.

Wir nehmen nun an, daß die Anregung des Elektrons zum Zeitpunkt t_0 und der Strahlungsprozess zum Zeitpunkt t_1 stattfinden, und machen daher für die Übergangsmatrixelemente den Ansatz

$$\langle \varphi_e | \partial_t | \varphi_{e'} \rangle = \alpha_{ee'} \delta(t - t_0) \quad (3.44)$$

$$\langle \varphi_e | \vec{j} \cdot \vec{q}^* | \varphi_{e'} \rangle = \beta_{ee'} \delta(t - t_1)$$

Die β_t - Kopplung soll dabei so schwach sein, daß die Anregung störungstheoretisch behandelt werden kann. In 1. Ordnung erhalten wir:

$$\begin{aligned} c_{n1}^{(1)} &= c_{n1}^{(0)} - A_{n1} \Theta(t_1 - t_0) + B_{n1} \Theta(t_0 - t_1) \\ H_{n1}^{(1)} &= H_{n1}^{(0)} - (A_{n1} + B_{n1}) \Theta(t_1 - t_0) \end{aligned} \quad (3.45a,b)$$

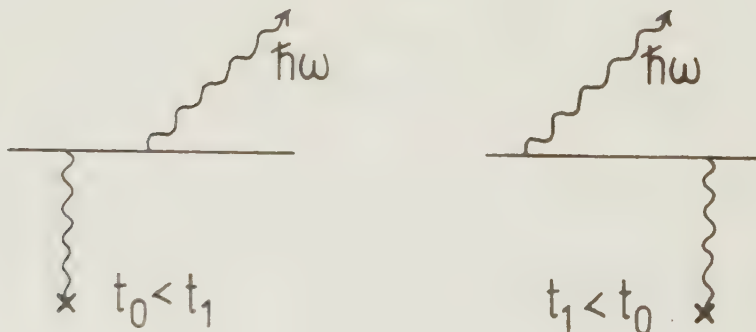
mit

$$c_{n1}^{(0)} = H_{n1}^{(0)} = \beta_{n1} e^{i \int_{t_0}^{t_1} dt (\omega_n - \omega_1) + i \omega t_1} \quad (3.46 a,b,c)$$

$$A_{n1} = \sum_{e > F_0} \beta_{ne} \alpha_{e1} e^{i \int_{t_0}^{t_1} dt (\omega_n - \omega_e) + i \int_{t_0}^{t_1} dt (\omega_e - \omega_1) + i \omega t_1}$$

$$B_{n1} = \sum_{e > F_0} \beta_{e1} \alpha_{en} e^{i \int_{t_0}^{t_1} dt (\omega_e - \omega_1) + i \int_{t_0}^{t_1} dt (\omega_n - \omega_e) + i \omega t_1}$$

wobei $\Theta(t)$ die Sprungfunktion ist. (3.45a) zeigt eine Analogie zur Elektronenbremsstrahlung in Anwesenheit eines äußeren Feldes: die zwei Terme, die in erster Ordnung beitragen, entsprechen in Bezug auf die zeitliche Reihenfolge von Anregung und Strahlung den beiden Graphen:



Eine derartige Interpretation ist für ϵ_{nn} nicht möglich, weil (3.45b) nicht aus der Störungstheorie im Wechselwirkungsbild abgeleitet wurde. Entscheidend ist jedoch, daß die Intensität nicht vom Gebrauch von ϵ_{nn} oder μ_{nn} abhängt, was für den allgemeinen Fall im Anfang gezeigt wird. Für unser schematisches Beispiel kann man es leicht durch explizite Berechnung beweisen. Wegen

$$\Theta(t_0 - t_1) = 1 - \Theta(t_1 - t_0)$$

ist

$$c_{nn}^{(1)} = H_{nn}^{(1)} + I_{nn}$$

Bei Vernachlässigung aller Terme $\sim \omega_{nn}^2$ erhalten wir

$$I = \sum_{n \neq \bar{n}_0} |c_{nn}^{(1)}|^2 = \sum_{n \neq \bar{n}_0} |H_{nn}^{(1)}|^2 + I_0$$

mit

$$I_0 = \sum_{n \neq \bar{n}_0} H_{nn}^{(0)*} B_{nn} + H_{nn}^{(0)} B_{nn}^*$$

Durch Einsetzen von (3.45a,c) sieht man, daß

$$I_0 = \sum_{n \neq \bar{n}_0} (\beta_{nn} \beta_{nn}^* e^{i \sum_{m \neq n} \omega_m (t_1 - t_0)} + \beta_{nn}^* \beta_{nn} e^{-i \sum_{m \neq n} \omega_m (t_1 - t_0)}) \omega_{nn}$$

verschwindet, weil der Ausdruck in der Klammer symmetrisch in $n, \bar{n}$ ist, während entsprechend der Antisymmetrie der ∂_t - Matrixelemente $\omega_{n\bar{n}} = -\omega_{\bar{n}n}$ gilt.

4. Strahlungsquerschnitt und Anisotropie im Schwerionenstoß

Zunächst fassen wir die Formeln zur Berechnung der Querschnitte und der Anisotropie zusammen. Es ist

$$\frac{d\sigma}{d\omega d\Omega_K d\Omega_N} = \frac{\omega^2}{(2\pi)^3} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega_N} \right)_{\text{Ruth}} \sum_{\lambda} I(\vec{k}, \lambda) \quad (4.1a)$$

$$\frac{d\sigma}{d\omega d\Omega_K} = \frac{\omega^2}{(2\pi)^3} \int_0^\infty b db \sum_{\lambda} \int_0^{2\pi} d\varphi_N I(\vec{k}, \lambda) \quad (4.1b)$$

$$\overline{\frac{d\sigma}{d\omega d\Omega_K}}^{\varphi_K} = \frac{\omega^2}{(2\pi)^3} \int_0^\infty b db \sum_{\lambda} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi_N d\varphi_K I(\vec{k}, \lambda) \quad (4.1c)$$

$$\frac{d\sigma}{d\omega} = 2\pi \int_0^\pi \sin\vartheta_K d\vartheta_K \overline{\frac{d\sigma}{d\omega d\Omega_K}}^{\varphi_K} \quad (4.1d)$$

$$\eta = \frac{\overline{\frac{d\sigma}{d\omega d\Omega_K}}^{\varphi_K} \Big|_{\vartheta_K=90^\circ}}{\overline{\frac{d\sigma}{d\omega d\Omega_K}}^{\varphi_K} \Big|_{\vartheta_K=0^\circ}} - 1 \quad (4.1e)$$

mit

$$I(\vec{k}, \lambda) = \sum_{\substack{n>F \\ m<F}} |H_{\vec{k}\lambda}^{nm}|^2 + \left| \sum_n \tilde{H}_{\vec{k}\lambda}^{nn} \right|^2 \quad (4.2)$$

und

$$H_{\vec{k}\lambda}^{nm} = -\frac{e}{(2\omega)^{1/2}} \int dt e^{i\omega t} \times \quad (4.3)$$

$$\times \sum_{e, e'} b_{ne}^{(+)*} b_{me'}^{(+)} e^{i \int_0^t dt' (\omega_e - \omega_{e'})} \langle \varphi_e | \vec{E}_\lambda e^{-i\vec{k}\vec{x}} \vec{r} | \varphi_{e'} \rangle$$

Da der Photonenpolarwinkel φ_k i.a. nicht gemessen wird, berechnen wir die Anisotropie über den gemittelten Querschnitt (4.1c). Die Zweizentren - Wellenfunktionen φ_e werden im mitrotierenden CM - System bestimmt, der Photonenvektor $\vec{k}$ sowie der Polarisationsvektor $\vec{e}_\lambda$ aber im "Photonen" - System, dessen Z - Achse parallel zu $\vec{k}$ gewählt wird. Beide Systeme erlauben eine relativ einfache Beschreibung der jeweiligen Größe, doch muß zur Berechnung der Strahlungsmatrixelemente das Photon in das System der Wellenfunktionen transformiert werden (oder umgekehrt). Ferner muß das Matrixelement selbst im nichtmitrotierenden CM - System dargestellt werden, da dort die Integration über die Streu- und Photonenwinkel erfolgt. Wir haben also mit drei Systemen zu arbeiten, die wir jetzt genauer spezifizieren wollen.

4.1 Systemtransformationen

Wir führen folgende Bezeichnungen ein und verwenden dabei die Symbole der Figur (12.a,b,c)

S_1 - inertiales CM - System; Z_1 - Achse ist die Strahlachse, die Y_1 - Achse geht durch Drehung (Drehwinkel $-\tilde{\varphi}_N = \frac{\pi}{2} - \varphi_N$) aus Y_S hervor, wobei Y_S und $Z_1 = Z_S$ die Streuebene aufspannen.

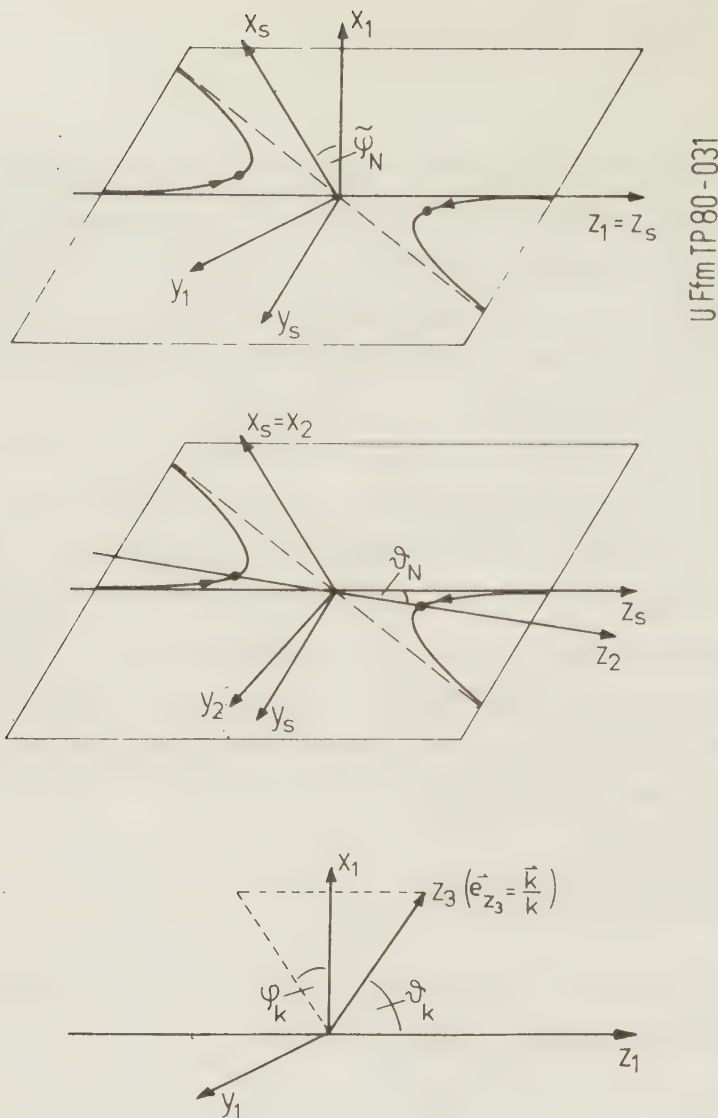
S_2 - momentan körperfestes CM - System; die Z_2 - Achse liegt in der Verbindungslinie der Kerne, die Y_2 - Achse in der Streuebene

S_3 - Photonen - System mit $\vec{e}_{\lambda_3} = \frac{\vec{k}}{|\vec{k}|}$.

Die Darstellung eines Vektors $\vec{a}$ in den verschiedenen Systemen wird dann durch die Transformation $R(n,m)$ vom System S_m ins System S_n vermittelt:

$$\vec{a}^{S_n} = R(n,m) \vec{a}^{S_m} \quad (4.4)$$

Die Matrix $R(n,m)$ kann durch elementare Drehungen um je 2 Achsen konstruiert werden, z.B. erhält man $R(1,3)$ durch



Figur 12:

Der Zusammenhang zwischen den verschiedenen Koordinatensystemen.

- (a) Das inertielle Schwerpunktsystem S_1 mit den Achsen X_1 , Y_1 , Z_1 erhält man durch eine Drehung des Systems der Streuebene um $-\tilde{\varphi}_N$ um die $Z_5 = Z_1$ - Achse.
- (b) Die Z - Achse des momentan körperfesten Systems S_2 , Z_2 , liegt in der Verbindungslinie der Kerne, die sich entlang von Coulomb - Trajektorien bewegen. Die Asymptoten der Hyperbeln sind die Z_5 - Achse und die gestrichelte Gerade. S_2 geht durch eine Drehung (Drehwinkel $-\tilde{\varphi}_N$) um die $X_2 = X_5$ - Achse in das Streusystem über. Ein Vektor in Richtung von Z_2 hat in S_1 die Polarwinkel $\tilde{\varphi}_N$ und φ_N , wobei $\varphi_N = \varphi_2 + \tilde{\varphi}_N$ ist.
- (c) Der Wellenvektor $\vec{k}$ legt die Z - Achse des Photonensystems fest. Die Achsen X_3 , Y_3 sind in der Ebene senkrecht zu Z_3 frei wählbar (im Sinne eines kartesischen Rechtssystems), $\tilde{\varphi}_k$ und φ_k sind die Polarwinkel des Photons in S_1 .

eine Drehung um x_3 um $-\vartheta_k$, dargestellt durch

$$D_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \vartheta_k & \sin \vartheta_k \\ 0 & -\sin \vartheta_k & \cos \vartheta_k \end{pmatrix}$$

und anschließend eine Drehung um $z_3^I = z_1$ um $-(\frac{\pi}{2} - \varphi_k)$

$$D_2 = \begin{pmatrix} \sin \varphi_k & \cos \varphi_k & 0 \\ -\cos \varphi_k & \sin \varphi_k & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

d.h.

$$R(1,3) = D_2 \circ D_1 = \begin{pmatrix} \sin \varphi_k & \cos \vartheta_k \cos \varphi_k & \sin \vartheta_k \cos \varphi_k \\ -\cos \varphi_k & \cos \vartheta_k \sin \varphi_k & \sin \vartheta_k \sin \varphi_k \\ 0 & -\sin \vartheta_k & \cos \vartheta_k \end{pmatrix} \quad (4.5)$$

Man kann erkennen, daß $R(1,3)$ angewendet auf $\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ zur bekannten Darstellung in Polarkoordinaten führt. Analog läßt sich $R(2,1)$ konstruieren:

$$R(2,1) = \begin{pmatrix} \sin \varphi_N & -\cos \varphi_N & 0 \\ \cos \vartheta_N \cos \varphi_N & \cos \vartheta_N \sin \varphi_N & -\sin \vartheta_N \\ \sin \vartheta_N \cos \varphi_N & \sin \vartheta_N \sin \varphi_N & \cos \vartheta_N \end{pmatrix} \quad (4.6)$$

wobei wir gleichzeitig von der Orthogonalität der Drehung Gebrauch gemacht haben:

$$R(m,n) = R^{-1}(n,m) = R^T(n,m) \quad (4.7)$$

Den Zusammenhang von S_2 und S_3 erhält man durch Hintereinanderschalten von (4.5) und (4.6):

$$R(2,3) = R(2,1) \circ R(1,3) \quad (4.8)$$

Wir werden später die Darstellung des Photon - Vektors $\vec{k}$ in S_2 benötigen und suchen daher eine Relation zwischen $\vartheta_K, \varphi_K, \vartheta_N, \varphi_N$ einerseits und den Polarwinkeln von $\vec{k}$ in S_2 , ϑ_f, φ_f andererseits. Zunächst ist

$$\vec{k}^{S_2} = k \begin{pmatrix} \sin \vartheta_f \cos \varphi_f \\ \sin \vartheta_f \sin \varphi_f \\ \cos \vartheta_f \end{pmatrix}^{S_2} \quad (4.9a)$$

Nach (4.4) - (4.8) gilt auch

$$\begin{aligned} \vec{k}^{S_2} &= R(2,1) \circ R(1,3) \vec{k}^{S_3} \\ &= k \begin{pmatrix} \sin \vartheta_K \sin (\varphi_N - \varphi_K) \\ \sin \vartheta_K \cos \vartheta_N \cos (\varphi_N - \varphi_K) - \sin \vartheta_N \cos \vartheta_K \\ \sin \vartheta_K \sin \vartheta_N \cos (\varphi_N - \varphi_K) + \cos \vartheta_N \cos \vartheta_K \end{pmatrix}^{S_2} \end{aligned} \quad (4.9b)$$

wobei

$$\vec{k}^{S_3} = k \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}^{S_3}$$

benutzt wurde. Durch Vergleich von (4.9a) mit (4.9b) erhalten wir:

$$\begin{aligned} \cos \vartheta_f &= \sin \vartheta_K \sin \vartheta_N \cos (\varphi_N - \varphi_K) + \cos \vartheta_K \sin \vartheta_N \\ \cos \varphi_f &= \sin \vartheta_K \sin (\varphi_N - \varphi_K) / \sin \vartheta_f \end{aligned} \quad (4.9c)$$

Für $\vartheta_f = 0$ ist φ_f unbestimmt.

4.2 Multipolentwicklung

Um über den Winkelanteil der Strahlungsmatrixelemente in (4.3) analytisch integrieren zu können, wird eine Multipolentwicklung des Strahlungsfeldes durchgeführt. Wir stellen

hier die wichtigsten Beziehungen zusammen und verwenden die Notationen von Rose³⁹. In S_3 wird ein Photon entwickelt in (Rose, Gl. 7.37)

$$(\vec{\epsilon}_\lambda e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}})^{S_3} = \sqrt{2\pi} \sum_{L=1}^{\infty} i^L (2L+1) [\vec{A}_{L\lambda}(m) + i\lambda \vec{A}_{L\lambda}(e)]^{S_3}$$

wobei nur der transversale Anteil berücksichtigt wurde.

Wegen $\vec{\epsilon}_\lambda \cdot \vec{k} = 0$ nimmt λ die Werte ± 1 an, wenn $\vec{\epsilon}_\lambda^{S_3}$ beschrieben wird durch

$$\vec{\epsilon}_\lambda^{S_3} = -\lambda \vec{\xi}_\lambda^{S_3} \quad (4.10)$$

mit den sphärischen Einheitsvektoren

$$\vec{\xi}_{\pm 1} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (\vec{e}_x \pm i\vec{e}_y), \quad \vec{\xi}_0 = \vec{e}_z \quad (4.11)$$

Die Entwicklung in S_2 erhält man durch Drehung in der üblichen Art (Rose, Gl. 4.18a)

$$\vec{A}_{L\lambda}^{S_3}(g, \varphi_3, \vartheta_3) = \sum_{M=-L}^L D_{M\lambda}^L(\varphi_3, \vartheta_3, 0) \vec{A}_{LM}^{S_2}(g, \varphi_2, \vartheta_2), \quad g = m, e$$

mit den im vorigen Abschnitt eingeführten Polarwinkeln von $\vec{k}$ in S_2 , φ_3 und ϑ_3 , so daß gilt (Rose, Gl. 7.38):

$$(\vec{\epsilon}_\lambda e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}})^{S_2} = \sqrt{2\pi} \sum_L \sum_M i^L (2L+1)^{1/2} D_{M\lambda}^L [\vec{A}_{LM}(m) + i\lambda \vec{A}_{LM}(e)]^{S_2} \quad (4.12)$$

Im folgenden geben wir den Systemindex nicht an, verstehen aber alle Vektoren und Koordinaten im System S_2 , d.h. im mitrotierenden System. Der magnetische Anteil $\vec{A}_{LM}(m)$ und der elektrische $\vec{A}_{LM}(e)$ der Strahlung können nach Vektorkugelfunktionen $\vec{T}_{LM}$ entwickelt werden (Rose, Gln. 7.26, 7.32b, 5.57)

$$\vec{A}_{LM}(m) = j_L(kr) \vec{T}_{LM} \quad (4.13a, b)$$

$$\vec{A}_{LM}(e) = -\left(\frac{L}{2L+1}\right)^{1/2} j_{L+1}(kr) \vec{T}_{L+1,1} + \left(\frac{L+1}{2L+1}\right)^{1/2} j_{L-1}(kr) \vec{T}_{L-1,1}$$

wobei

$$\vec{T}_{LM} = \sum_m C(\ell 1 L; M-m m) Y_{L M-m} \vec{\xi}_m \quad (4.14)$$

Die Entwicklung des konjugiert - komplexen Feldes ist dann gegeben durch (Rose, Gln. 4.22, III.23):

$$\vec{A}_{LM} e^{-ikr} = \frac{1}{r} \sum_{\lambda} \sum_{\mu} (-i)^L (2L+1)^{\frac{1}{2}} D_{\mu\lambda}^L [\vec{A}_{LM}^{(m)} - i\lambda \vec{A}_{LM}(e)] \quad (4.15)$$

4.3 Zweizentrenwellenfunktionen

Zur Charakterisierung einer Zweizentrenlösung ψ_L liegt i.a. nur eine gute Quantenzahl vor - die Projektion μ des Gesamtdrehimpulses j auf Z_2 , die Verbindungsachse der beiden Kerne. In symmetrischen Systemen hat man als weitere Quantenzahl die Parität. Die Ursache dafür liegt einfach darin, daß der Drehimpuls in nicht zentralen Potentialen keine Erhaltungsgröße ist. Infolgedessen wird jede Eigenlösung eine Überlagerung von Zuständen mit bestimmtem Drehimpuls sein:

$$\varphi_{\mu}^n = \sum_{\kappa} \varphi_{\mu\kappa}^n = \sum_{\kappa} \begin{pmatrix} G_{\kappa}^n \chi_{\kappa}^{\mu} \\ i F_{\kappa}^n \chi_{-\kappa}^{\mu} \end{pmatrix} \quad (4.16)$$

φ_{μ}^n ist ein 4 - komponentiger Bispinor, G_{κ}^n der Radialteil der "großen", F_{κ}^n der der "kleinen" Komponente. κ durchläuft den Wertebereich

$$\pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$$

und ist mit j , bzw. dem Bahndrehimpuls l folgendermaßen verknüpft:

$$\kappa = \begin{cases} l & ; \quad j = l - \frac{1}{2} \\ -l-1 & ; \quad j = l + \frac{1}{2} \end{cases}$$

bzw.

$$\begin{aligned} j &= |k| - \frac{1}{2} \\ \ell &= |k + \frac{1}{2}| - \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (4.17)$$

Der Index n numeriert die Zustände mit demselben μ durch:

φ_μ^n ist der n -te μ -Zustand ($\mu = \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}, \dots$).

Der Winkelanteil von φ_μ^n wird durch die (2-komponentigen) Spinoren χ_μ^m beschrieben:

$$\chi_\mu^m = \sum_{m=\pm \frac{1}{2}} C(\ell \pm \frac{1}{2} j; \mu-m m) Y_{\ell \mu-m} \chi_m \quad (4.18)$$

mit

$$\chi_m = \begin{cases} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} & : m = +\frac{1}{2} \\ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} & : m = -\frac{1}{2} \end{cases}$$

Durch Einsetzen von (4.16) in (3.17) erhält man nach Projektion auf die Winkelbasis (4.18) die Differentialgleichungen für die radialen Komponenten⁴⁰:

$$\frac{dF_k^n}{dr} = \frac{k-1}{r} F_k^n - (E-m) G_k^n + \sum_{k'} G_{k'}^n \langle \chi_k^\mu | V_{TC} | \chi_{k'}^\mu \rangle$$

$$\frac{dG_k^n}{dr} = (E+m) F_k^n - \frac{k+1}{r} G_k^n - \sum_{k'} F_{k'}^n \langle \chi_{-k}^\mu | V_{TC} | \chi_{-k'}^\mu \rangle$$

4.4 Strahlungsmatrixelemente

Wir wenden uns nun der Berechnung der Strahlungsmatrixele-

mente $\langle \varphi_{\mu_f} | \vec{E}_\lambda^* e^{-i\vec{k}\vec{r}} \vec{f} | \varphi_{\mu_i} \rangle$ zu. Wir bemerken, daß
 $\vec{f} = \gamma_0 \vec{\alpha}$,

$$\vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}$$

und

$$\langle \Psi_n | \hat{\sigma} | \Psi_m \rangle = \int d\vec{r} \Psi_n^+ \gamma_0 \hat{\sigma} \Psi_m$$

ist. Da $\vec{\alpha}$ nur bis auf eine unitäre Transformation bestimmt ist, ist die obige Wahl sicherlich auch in S_2 möglich. Mit (4.15) und (4.16) erhalten wir

$$\begin{aligned} \langle \varphi_{\mu_f} | \vec{E}_\lambda^* e^{-i\vec{k}\vec{r}} | \varphi_{\mu_i} \rangle &= \\ &= \sqrt{2\pi} \sum_{LM} (-i)^L (2L+1)^{1/2} D_{M\lambda}^L \times \\ &\times \sum_{k_i, k_f} \int d\vec{r} \begin{pmatrix} G_{k_f} \chi_{k_f}^{\mu_f} \\ i F_{k_f} \chi_{-k_f}^{\mu_f} \end{pmatrix} \vec{\sigma} \cdot [\vec{A}_{LM}(m) - i\lambda \vec{A}_{LM}(e)] \begin{pmatrix} i F_{k_i} \chi_{-k_i}^{\mu_i} \\ G_{k_i} \chi_{k_i}^{\mu_i} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Wir haben dabei den unwesentlichen Phasenfaktor $(-)^{\lambda+1}$ sowie die Quantenzahlen n_i, n_f weggelassen. Mit (4.13a,b) und der Bezeichnung

$$f(\ell, k_f, k_i) = \langle \chi_{k_f}^{\mu_f} | \vec{\sigma} \cdot \vec{T}_{LM} | \chi_{-k_i}^{\mu_i} \rangle_\Omega \quad (4.19)$$

wobei $\langle \rangle_\Omega = \int_\Omega d\Omega$ und Ω der Elektronenraumwinkel ist, folgt dann

$$\begin{aligned} \langle \varphi_{\mu_f} | \vec{E}_\lambda^* e^{-i\vec{k}\vec{r}} \vec{f} | \varphi_{\mu_i} \rangle &= \\ &= \sqrt{2\pi} \sum_{LM} (-i)^{L-1} D_{M\lambda}^L (M L_{\mu_f \mu_i} - i\lambda E L_{\mu_f \mu_i}) \end{aligned} \quad (4.20)$$

Es wurde definiert:

$$\begin{aligned}
 M L_{\mu_f \mu_i} &= (2L+1)^{1/2} \sum_{k_f k_i} \int r^2 dr \left[G_{k_f} F_{k_i} f(L, k_f, k_i) - F_{k_f} G_{k_i} f(L, -k_f, -k_i) \right] j_L(kr) \\
 &= (2L+1)^{1/2} \sum_{k_f k_i} f(L, k_f, k_i) \int r^2 dr j_L(kr) \left[G_{k_f} F_{k_i} - F_{k_f} G_{-k_i} \right] \quad (4.21a)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 E L_{\mu_f \mu_i} &= \sum_{k_f k_i} \int r^2 dr \left\{ -L^{1/2} j_{L+1}(kr) \left[G_{k_f} F_{k_i} f(L+1, k_f, k_i) - F_{k_f} G_{k_i} f(L+1, -k_f, -k_i) \right] + \right. \\
 &\quad \left. + (L+1)^{1/2} j_{L-1}(kr) \left[G_{k_f} F_{k_i} f(L-1, k_f, k_i) - F_{k_f} G_{k_i} f(L-1, -k_f, -k_i) \right] \right\} \\
 &= \sum_{k_f k_i} \int r^2 dr \left[-L^{1/2} j_{L+1}(kr) f(L+1, k_f, k_i) + (L+1)^{1/2} j_{L-1}(kr) \times \right. \\
 &\quad \left. \times f(L-1, k_f, k_i) \right] (G_{k_f} F_{k_i} - F_{k_f} G_{-k_i}) \quad (4.21b)
 \end{aligned}$$

Zur Berechnung des Matrixelementes $f(\ell, k_f, k_i)$ betrachten wir das Produkt $\vec{G} \cdot \vec{T}_{L\ell m}$:

$$\begin{aligned}
 \vec{G} \cdot \vec{T}_{L\ell m} &= \sum_m C(\ell 1 L; M-m m) Y_{\ell M-m} \vec{G} \cdot \vec{\xi} \\
 &= \sum_m C(\ell 1 L; M-m m) Y_{\ell M-m} G_m \\
 &= : \left[Y_{(\ell)} \times G_{(1)} \right]^{L, M}
 \end{aligned}$$

d.h. $\tilde{T}_{\ell_1 \ell_2 \ell_3}$ stellt einen Tensor der Stufe L dar. Durch Anwendung des Wigner - Eckart - Theorems folgt:

$$f(\ell_1, m_1, \kappa_1) = (-1)^{j_1 - m_1} \begin{pmatrix} j_1 & L & j_1 \\ -m_1 & M & m_1 \end{pmatrix} (j_1 \ell_1 \frac{1}{2} \| [\gamma_{(\ell)} \times G_{(1)}]^L \| j_1 \ell_1 \frac{1}{2})$$

Wir folgen hierbei der Notation von de - Shalit/Talmi⁴¹. Das reduzierte Matrixelement ist gegeben durch

$$(j_1 \ell_1 \frac{1}{2} \| [\gamma_{(\ell)} \times G_{(1)}]^L \| j_1 \ell_1 \frac{1}{2}) = \\ = \left[\frac{(2j_1+1)(2L+1)(2j_1+1)}{4\pi} \right]^{\frac{1}{2}} (\ell_1 \| \gamma_{(\ell)} \| \ell_1) (\frac{1}{2} \| G_{(1)} \| \frac{1}{2}) \begin{Bmatrix} \ell_1 & \frac{1}{2} & j_1 \\ \ell_1 & \frac{1}{2} & j_1 \\ \ell & 1 & L \end{Bmatrix}$$

Mit

$$(\ell_1 \| \gamma_{(\ell)} \| \ell_1) = (-1)^{\ell_1} \left[\frac{(2\ell_1+1)(2\ell+1)(2\ell_1+1)}{4\pi} \right]^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} \ell_1 & \ell & \ell_1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

und

$$(\frac{1}{2} \| G_{(1)} \| \frac{1}{2}) = \sqrt{6}$$

erhalten wir schließlich

$$f(\ell_1, m_1, \kappa_1) = (-1)^{j_1 - m_1 + \ell_1} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \left[(2j_1+1)(2L+1)(2j_1+1)(2\ell_1+1)(2\ell+1)(2\ell_1+1) \right]^{\frac{1}{2}} \times \\ \times \begin{pmatrix} \ell_1 & \ell & \ell_1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & L & j_1 \\ -m_1 & M & m_1 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} \ell_1 & \frac{1}{2} & j_1 \\ \ell_1 & \frac{1}{2} & j_1 \\ \ell & 1 & L \end{Bmatrix} \quad (4.22)$$

Das zweite $3j$ - Symbol in (4.22) enthält ein Kronecker - Delta:

$$\begin{pmatrix} j_1 & L & j_1 \\ -m_1 & M & m_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_1 & L & j_1 \\ -m_1 & m_1 - m_1 & m_1 \end{pmatrix} \delta_{M, m_1 - m_1}$$

weshalb in der M - Summation in (4.20) nur ein Term beiträgt:

$$\begin{aligned} \langle \varphi_{\mu_f} | \vec{\varepsilon}_\lambda^* e^{-i\vec{k}\vec{r}} \vec{r} | \varphi_{\mu_i} \rangle &= \\ &= \sqrt{2\pi} \sum_L (-i)^{L-1} D_{\mu_f-\mu_i, \lambda}^L (M_{L\mu_f\mu_i} - i\lambda E_{L\mu_f\mu_i}) \end{aligned} \quad (4.23)$$

4.5 Zur Berechnung der Querschnitte

Wir wollen jetzt noch einmal kurz den Weg skizzieren, der zur numerischen Auswertung der Querschnitte führt.

Zunächst sind die Zweizentrenwellenfunktionen (4.16) zu bestimmen, und anschließend ist das Differentialgleichungssystem (3.19) bei allen Anfangsbedingungen ($t = -\infty$) zu lösen. Mit Hilfe der Übergangsamplituden $b_{ne}^{(+)}$ können dann die Locherzeugungsraten (Gl. (3.22)) berechnet werden.

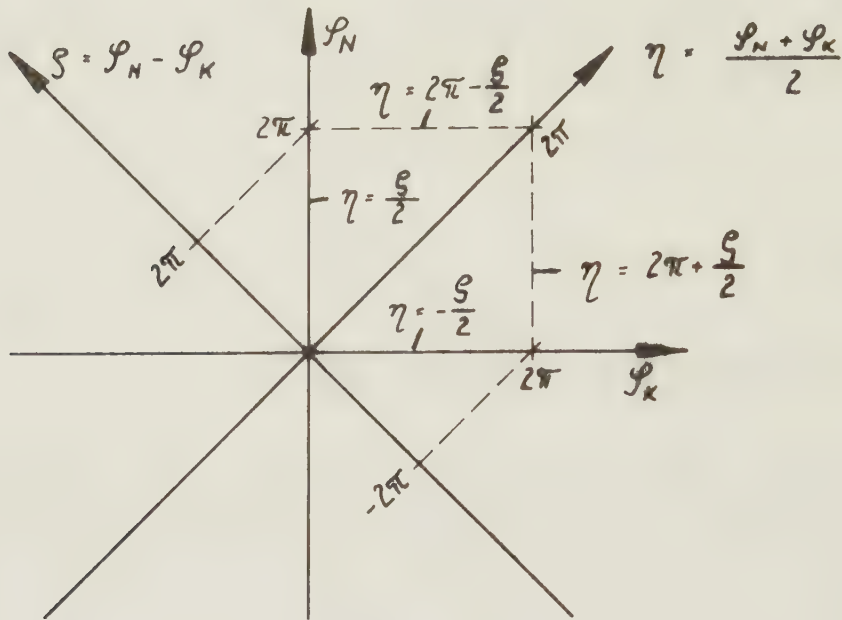
Für die Strahlungsquerschnitte müssen außerdem die Polariswinkel φ_f, ϑ_f nach (4.9c) und mit diesen die Drehmatrizen $D_{\mu_f-\mu_i, \lambda}^L(\varphi_f, \vartheta_f, 0)$ bestimmt werden. Mit den Strahlungsmatrixelementen (4.23) ist dann die Intensität (3.41) zu berechnen, aus der man durch Integration über die entsprechenden Winkel die Anisotropie (4.1e) und das Spektrum (4.1d) erhält.

Abschließend bemerken wir, daß das Doppelintegral in (4.1c)

$$\int_0^{2\pi} d\varphi_n \int_0^{2\pi} d\varphi_k I(\vec{k}, \lambda)$$

trotz der Zylindersymmetrie des Problems keineswegs trivial ist: Nach (4.9c) und (4.23) läßt sich die Abhängigkeit von φ_n und φ_k nicht vor das Zeitintegral (4.3) ziehen und

damit nicht analytisch ausführen. Da aber $I(\vec{k}, \lambda)$ nur von der Differenz $\varphi_N - \varphi_K$ abhängt, ist die in der Skizze angegebene Koordinatentransformation sinnvoll:



Für das Doppelintegral folgt:

$$\begin{aligned}
 \int_0^{2\pi} d\varphi_N \int_0^{2\pi} d\varphi_K I(\varphi_N - \varphi_K, \dots) &= \\
 &= \int_0^{2\pi} d\xi \int_0^{2\pi - \xi/2} d\eta I(\xi, \dots) + \int_{-2\pi}^0 d\xi \int_{-\xi/2}^{2\pi + \xi/2} d\eta I(\xi, \dots) \\
 &= \int_0^{2\pi} d\xi (2\pi - \xi) I(\xi, \dots) + \int_{-2\pi}^0 d\xi (2\pi + \xi) I(\xi, \dots) \\
 &= \int_{-2\pi}^{2\pi} d\xi (2\pi - |\xi|) I(\xi, \dots) \quad (4.24)
 \end{aligned}$$

so daß also nur eine Integration numerisch berechnet werden muß.

5. Multipoleffekte in der Locherzeugung

Wir stellen nun unsere Ergebnisse vor, die auf dem in den letzten beiden Kapiteln hergeleiteten Formalismus beruhen. Unseren Zweizentrenrechnungen lagen verschiedene Modelle zugrunde, die nur bestimmte innere, quasimolekulare Schalen miteinbeziehen. Solche Modelle ermöglichen keine quantitativen Aussagen, die man jedoch durch einen Vergleich mit Monopolrechnungen erhalten kann. Das Verfahren wird im Zusammenhang mit der Strahlung (Kapitel 6) besprochen.

In diesem Kapitel diskutieren wir den Einfluß der höheren Multipole des Zweizentrenpotentials

$$V_{TC}(\vec{r}, R) = \sum_{\ell=0}^{\infty} V_{\ell}(r, R) P_{\ell}(\cos \vartheta) \quad (5.1)$$

auf die K - Ionisation. Rechnungen, die nur auf dem Monopol - Term in der Entwicklung (5.1) beruhen, können bei Berücksichtigung der Abschirmungseffekte die gemessenen Querschnitte nur bis auf den Bereich kleiner Stoßparameter ($b \lesssim 30 \text{ fm}$) reproduzieren. Zu untersuchen ist daher, ob sich diese Abweichung auf die Multipole ($\ell \geq 1$) in (5.1) zurückführen läßt. Wir werden sehen, daß dieses Problem eng mit der Frage verknüpft ist, inwieweit das Eintauchen der quasimolekularen K - Schale durch Messung der Locherzeugungsrate (3.22) als Funktion des Stoßparameters nachgewiesen werden kann.

5.1 Die K - Ionisation als Nachweis des Eintauchprozesses

Ein analytischer Zusammenhang zwischen P_K , der K - Lochrate, und ω_{1s} , der Energie des 1s - Niveaus kann unter stark einschränkenden Voraussetzungen hergestellt werden⁴²:

$$P_K(b) \cong 8\pi^2 d_0^2 m_e e^{-\frac{4\alpha R_0(m_e - \omega_{1s}(R_0))}{v}} \quad (5.2)$$

wobei d_0 eine schwach von $Z_{\text{UA}} = Z_1 + Z_2$ abhängende Funktion

R_0 der Umkehrpunkt der Trajektorie (siehe Gl. (2.23)) und v die asymptotische Projektionsgeschwindigkeit ist. α ist definiert durch

$$\alpha(b) = \left[2 \left(1 - \frac{a}{R_0(b)} \right) \right]^{1/2} \quad (5.2a)$$

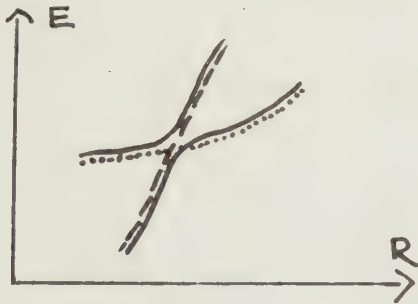
Eine der wesentlichen Vereinfachungen zur Ableitung von (5.2) ist die Monopolnäherung, die zumindest für asymmetrische Systeme fragwürdig erscheint. Jüngste experimentelle Resultate⁴³ deuten darauf hin: Die nach (5.2) bestimmte $1s$ - Bindungsenergie des vereinigten $Pb + Cm$ - Systems ($Z_{uA} = 178$) beträgt ungefähr eine Elektronenmasse und weicht damit von dem von der Dirac - Gleichung vorhergesagten Wert ($|E_B| > 2m_e$) deutlich ab. Folglich würde das $1s$ - Niveau nicht eintauchen, was das gesamte Konzept der QED starker Felder in Frage stellte. Es ist näherliegend, zunächst die Gültigkeit von (5.2), genauer gesagt, der Annahmen, die zu (5.2) führten, anzuzweifeln. Wir befassen uns im Folgenden also mit der Monopolnäherung und diskutieren ihren Einfluß auf die Ionisation am Beispiel des $Pb + Cm$ - Systems.

In asymmetrischen Systemen ist die Parität keine gute Quantenzahl, weshalb s - und p - Zustände, anders als in Monopolrechnungen, miteinander koppeln. Daß man dennoch im Experiment solchen Systemen den Vorzug vor symmetrischen gibt, liegt daran, daß die Locherzeugungsraten experimentell über die charakteristische K - Strahlung der einzelnen Atome nachgewiesen werden. Für symmetrische und nicht allzu asymmetrische Systeme gehen sowohl der quasimolekulare $1s\sigma$ - als auch der $2p_{1/2}\sigma$ - Zustand in die atomaren $1s$ - Niveaus über, weshalb man im symmetrischen Fall nicht entscheiden kann, in welchem der beiden MO's das beobachtete Loch erzeugt wurde. Bei asymmetrischen Systemen dagegen endet das $1s\sigma$ - Niveau in der K - Schale des schwereren Stoßpartners, während das $2p_{1/2}\sigma$ - Niveau in die K - Schale des leichteren Kerns übergeht. Der asymptotischen Kopplung beider Zustände kann man mit Hilfe des Ladungs - Transfer-

Modells von Demkov und Meyerhof⁴⁴ Rechnung tragen.

5.2 Die adiabatische Basis und ihre Diabatisierung

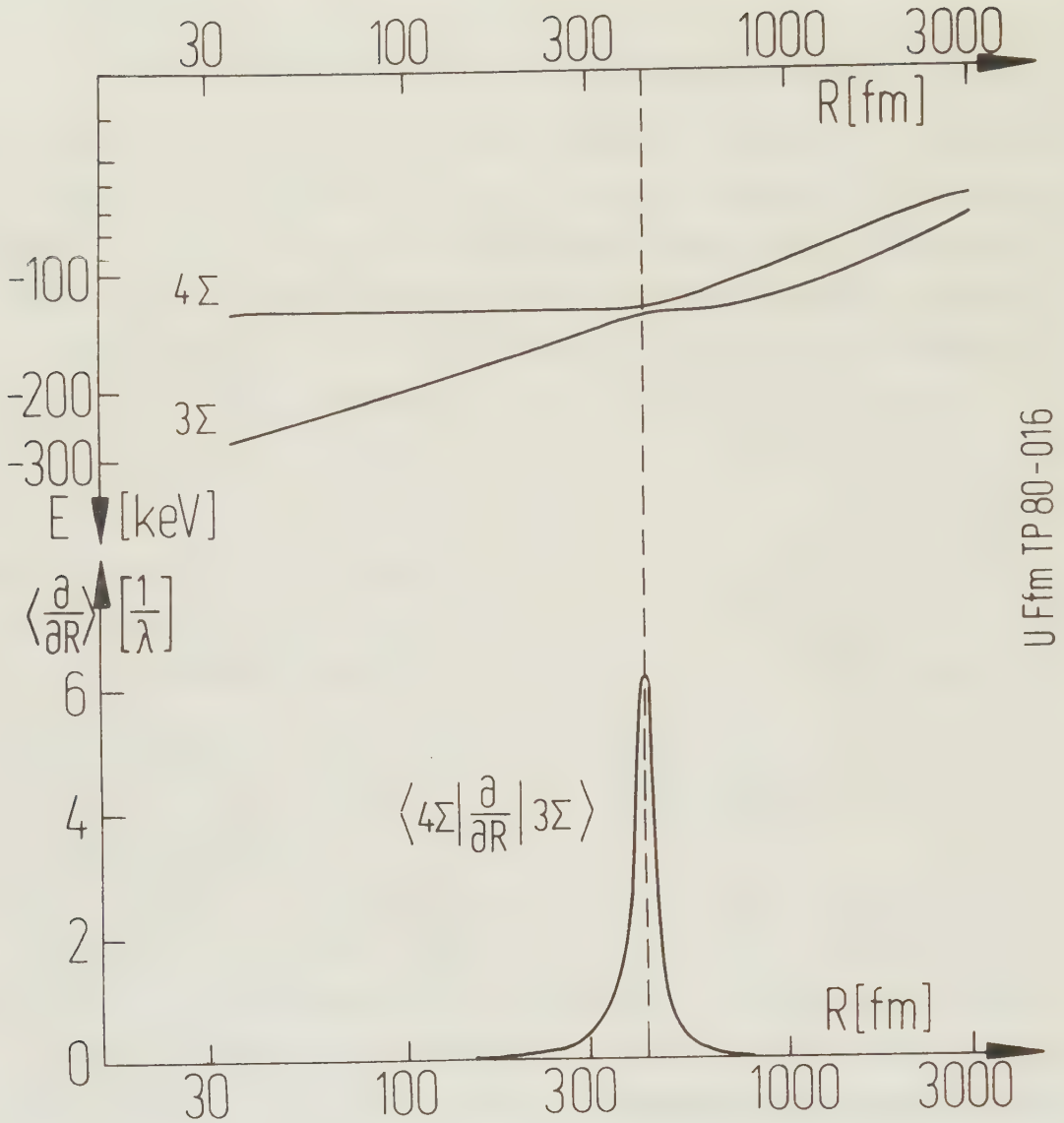
Besondere Bedeutung bei der Beschreibung der elektronischen Anregungsprozesse kommt der Wahl der Basis zu. In Abschnitt (3.2) hatten wir die adiabatische Basis eingeführt, durch deren Verwendung jedoch Probleme entstehen, die mit den (insbesondere bei asymmetrischen Systemen zahlreichen) "verbotenen" Kreuzungen⁴⁵ zusammenhängen. Betrachten wir z.B. ein 2 - Zustands - Modell wie in der Skizze angedeutet:



Während die Energien und damit die adiabatischen Zustände den durchgezogenen Linien folgen, werden die Wellenfunktionen, d.h. die Elektronen, je schneller der Stoß ist, eher entlang der gestrichelten bzw. gepunkteten Linie laufen. Die

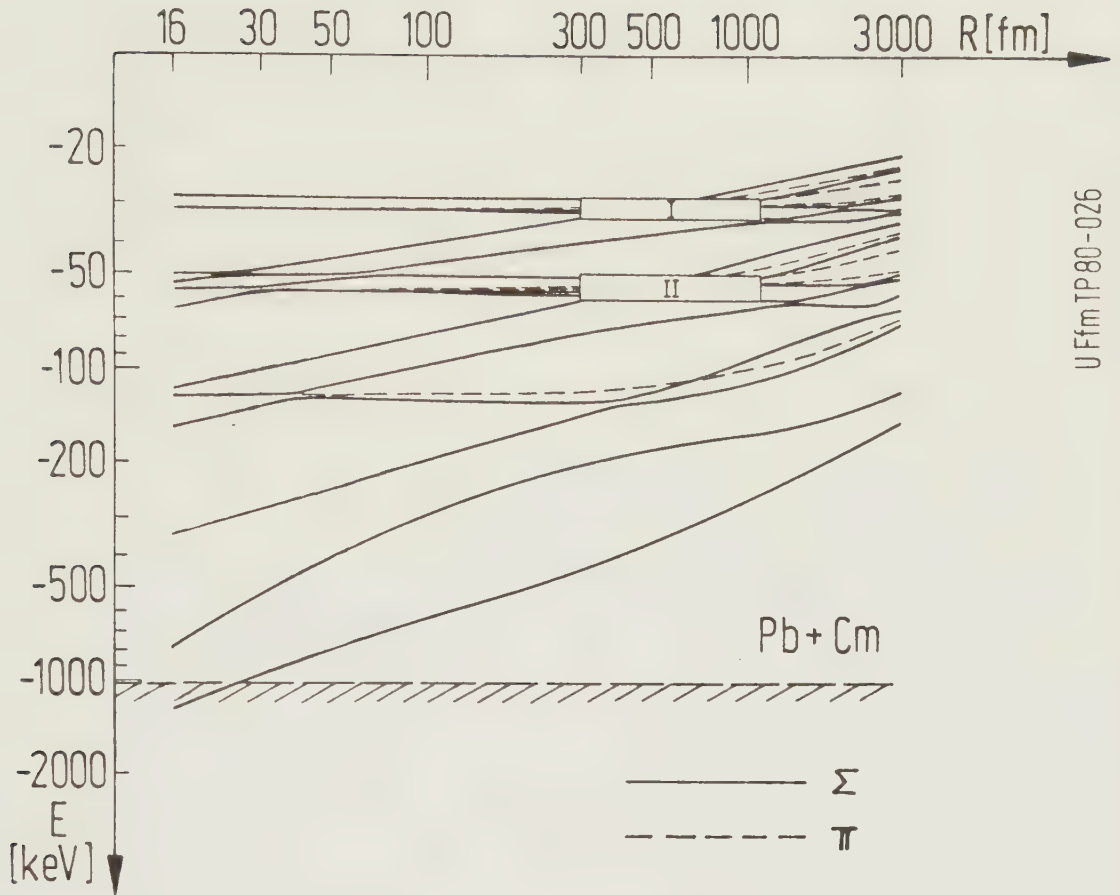
$\mathcal{C}_R$ - Kopplung hat daher im Kreuzungsbereich eine ausgeprägte Peak - Struktur wie man in Figur 13 für die " $2s\sigma$ " / " $2p_{3/2}\sigma$ " - Kreuzung des Pb + Cm - Systems erkennen kann. Dort ist auch die korrekte Notation der Zustände eingeführt: Einzig gute Quantenzahl ist die Projektion M_j des Gesamtdrehimpulses auf die Kern - Kern - Achse, $M_j \in \{\Sigma, \Pi, \Delta, \dots\}$, Zustände mit gleichem M_j werden entsprechend ihrer Energie von unten nach oben durchnummeriert. Daher ändert sich vor bzw. nach verbotenen Kreuzungen die Bezeichnung gegenüber der bisherigen ($1s\sigma$, $2s\sigma$, ...). Figur 14 zeigt das Korrelationsdiagramm der Σ - und Π - Orbitale (durchgezogen bzw. gestrichelt). Die Bereiche I, II sind in den nachfolgenden Figuren (15, 16) vergrößert dargestellt, so daß man deutlich die komplizierte Struktur der Kreuzungen erkennen kann⁴⁶.

Eine Alternative zur adiabatischen stellt die "diaba-



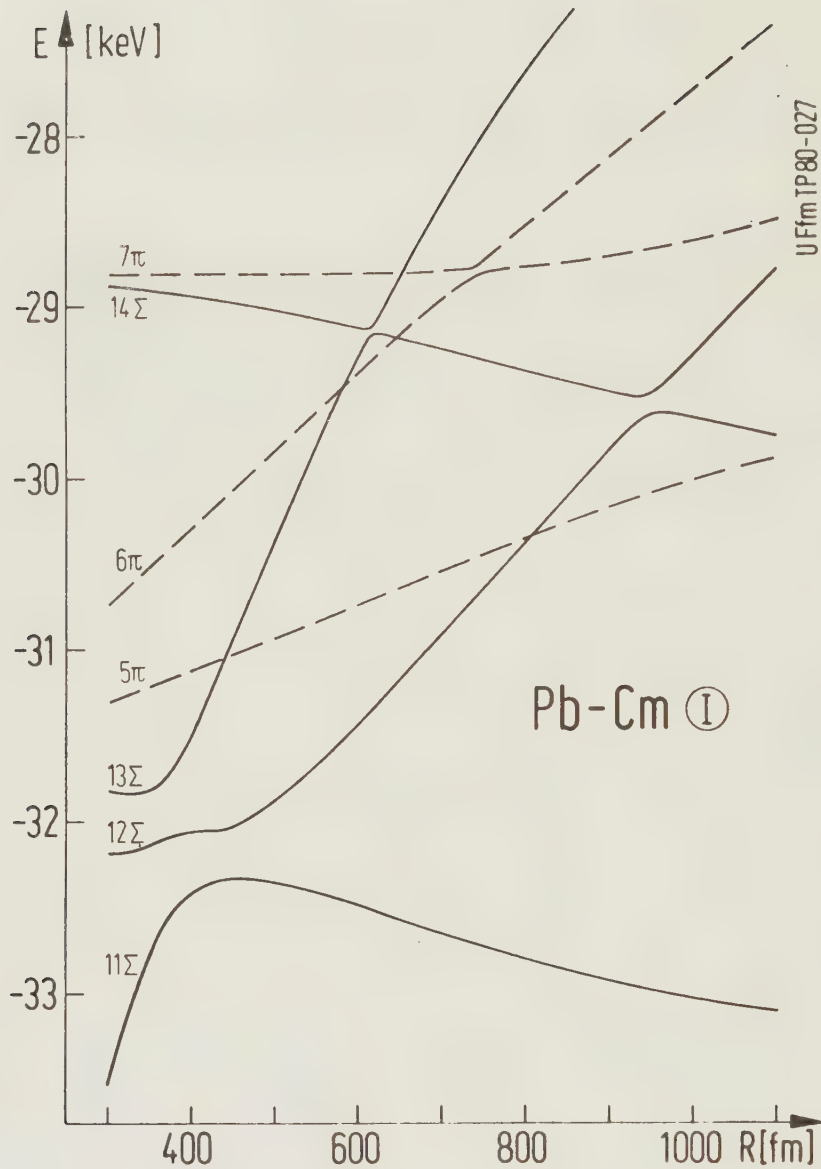
Figur 13:

Korrelationsdiagramm der Zustände 3Σ und 4Σ des $Pb + Cm$ -Systems und die zugehörige ∂_R -Kopplung. Im Kreuzungsbe-
reich (bei ca. 420 fm) wird das Matrixelement maximal.



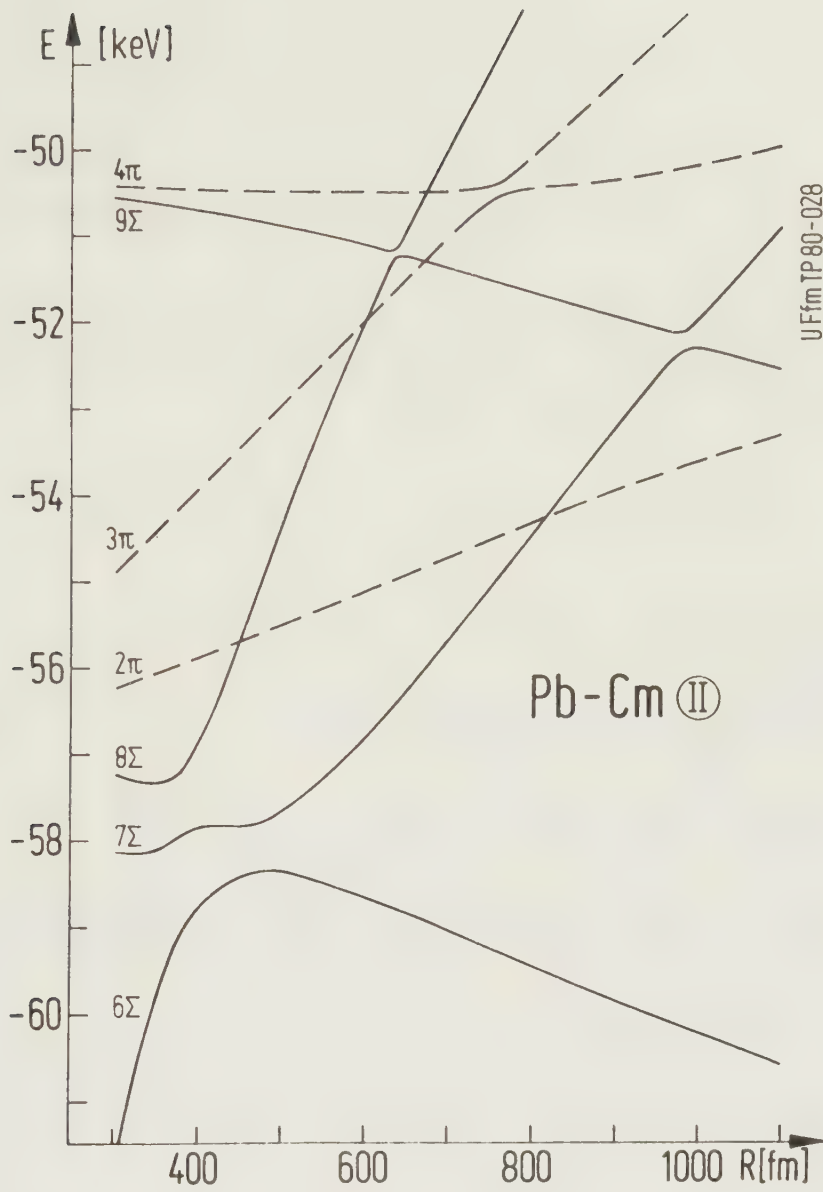
Figur 14:

Das $Pb + Cm$ - Korrelationsdiagramm der adiabatischen Zwei-zentrenenergien. Die Niveaus (durchgezogen Σ , gestrichelt π) werden von unten nach oben abgezählt.



Figur 15:

Vergrößerung des Ausschnitts I der Fig. 14. Manche Zustände haben mehrere gemeinsame Bereiche verbotener Kreuzungen (z. B. die Orbitale 12Σ und 13Σ bei 380 fm und 930 fm). Es existieren auch Pseudokreuzungen, an denen 3 Zustände beteiligt sind (z.B. 11Σ , 12Σ , 13Σ bei ca. 400 fm).



Figur 16:

Vergrößerung des Ausschnitts II der Fig. 14. Die Struktur der Pseudokreuzungen ist der der vorigen Figur sehr ähnlich.

tische" Basis dar. Wir erläutern nun kurz die Methode der Diabatisierung adiabatischer Zustände, um die physikalische Bedeutung der beiden Basen besser zu verstehen. Dabei wird sich zeigen - was am Beispiel eines 2 - Zustandsmodells vorgeführt wird -, daß die Kopplungsmatrixelemente zwischen den adiabatischen Zuständen den Drehwinkel im Hilbert - Raum, d.h., die Transformation auf die diabatischen Zustände, festlegen.

In der neuen diabatischen Basis $\{\varphi_e^d\}$ sind im Gegensatz zur adiabatischen $\{\varphi_e^a\}$ alle Kreuzungen erlaubt. Die Transformation von $\{\varphi_e^a\}$ auf $\{\varphi_e^d\}$

$$\varphi_e^d = \sum_k c_{ek} \varphi_k^a \quad (5.3)$$

wird aus der Forderung bestimmt, daß keine ∂_R - Kopplungen mehr auftreten:

$$\langle \varphi_n^d | \partial_R | \varphi_m^d \rangle = 0 \quad (5.4)$$

d.h.

$$\sum_k c_{nk} \left(\sum_{k'} c_{mk'} \langle \varphi_k^a | \partial_R | \varphi_{k'}^a \rangle + \frac{dc_{mk}}{dR} \right) = 0 \quad (5.5)$$

(5.5) wird nur gelöst durch

$$\frac{dc_{mk}}{dR} + \sum_{k'} c_{mk'} \langle \varphi_k^a | \partial_R | \varphi_{k'}^a \rangle = 0 \quad (5.6)$$

da C invertierbar ist.

Durch (5.3) und (5.6) ist $\{\varphi_e^d\}$ eindeutig festgelegt, so daß jeder beliebige Zustand in dieser Basis entwickelt werden kann:

$$\psi_i = \sum_m d_{im} \varphi_m^d e^{-i \int^t dt' \omega_m^d} \quad (5.7)$$

Zur Bestimmung der Übergangsamplituden d_{im} wird (5.7) in die Zweizentren - Dirac - Gleichung eingesetzt. Es folgt

dann nach Projektion und unter Beachtung von (5.4)

$$\dot{\tilde{d}}_{in} = -i \sum_{m,k} c_{nk} c_{mk} \omega_k^a \tilde{d}_{im} \quad (5.8)$$

wobei

$$\tilde{d}_{im} = d_{im} e^{-i \int^t dt' \omega_m^d} \quad (5.9)$$

gesetzt wurde. Das diabatische Energieniveau ω_m^d ist gleich dem Erwartungswert des Dirac - Operators im Zustand φ_m^d :

$$\begin{aligned} \omega_m^d &= \langle \varphi_m^d | \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m_e + V_{TC} | \varphi_m^d \rangle \\ &= \sum_k c_{mk}^2 \omega_k^a \end{aligned} \quad (5.10)$$

Zur Berechnung der Locherzeugungsraten (3.22) beachten wir, daß

$$b_{kn} e^{-i \int^t dt' \omega_n^a} = \sum_e \tilde{d}_{ke} \langle \varphi_n^a | \varphi_e^d \rangle = \sum_e \tilde{d}_{ke} c_{en}$$

ist, so daß wegen

$$c_{en}(\infty) = \delta_{en} \quad (5.11)$$

folgt:

$$P_k = \sum_{n \neq F} |\tilde{d}_{kn}(\infty)|^2 \quad (5.12)$$

(5.11) ist Ausdruck der Bedingung, daß die ∂_R - Kopplung asymptotisch verschwindet.

Betrachten wir nun ein 2 - Zustandssystem φ_1^a, φ_2^a . Die Transformationsgleichung (5.6) ist dann gegeben durch:

$$\begin{aligned} \frac{dc_{n1}}{dR} &= g c_{n2} \\ \frac{dc_{n2}}{dR} &= -g c_{n1} \end{aligned} \quad (5.13)$$

mit

$$g \equiv \langle \varphi_2^a | \partial_R | \varphi_1^a \rangle \quad (5.13a)$$

Die Lösung erhält man durch Diagonalisation, d.h. wir setzen

$$f_{n1} = \lambda_1 c_{n1} + \lambda_2 c_{n2} \quad (5.14a)$$

und

$$\frac{df_n}{dR} = \tau g f_n \quad (5.14b)$$

Mit (5.13) folgt:

$$\begin{aligned} \frac{df_n}{dR} &= \lambda_1 g c_{n2} - \lambda_2 g c_{n1} = \\ &= \tau g f_n = \tau g \lambda_1 c_{n1} + \tau g \lambda_2 c_{n2} \end{aligned}$$

Koeffizientenvergleich ergibt

$$\begin{aligned} \tau \lambda_1 &= -\lambda_2 \\ \tau \lambda_2 &= \lambda_1 \end{aligned}$$

weshalb $\tau = \pm i$ ist. (5.14b) wird daher gelöst durch

$$f_{n\pm}(R) = f_{n\pm}(\infty) e^{\pm iG}$$

mit

$$G \equiv \int_{\infty}^R dR' g \quad (5.15)$$

c_{n1} und c_{n2} sind nach (5.14a) Linearkombinationen von $f_{n\pm}$:

$$c_{nj} = \gamma_{nj1} e^{iG} + \gamma_{nj2} e^{-iG}$$

wobei $\hat{r}_{nj}$ aus der Randbedingung

$$c_{nj}(\infty) = S_{nj}$$

der Normierung

$$\langle \varphi_n^d | \varphi_m^d \rangle = \sum_k c_{nk} c_{mk} = \delta_{nm}$$

und der bereits mehrfach verwendeten Phasenkonvention

$$c_{nj} \in \mathbb{R}$$

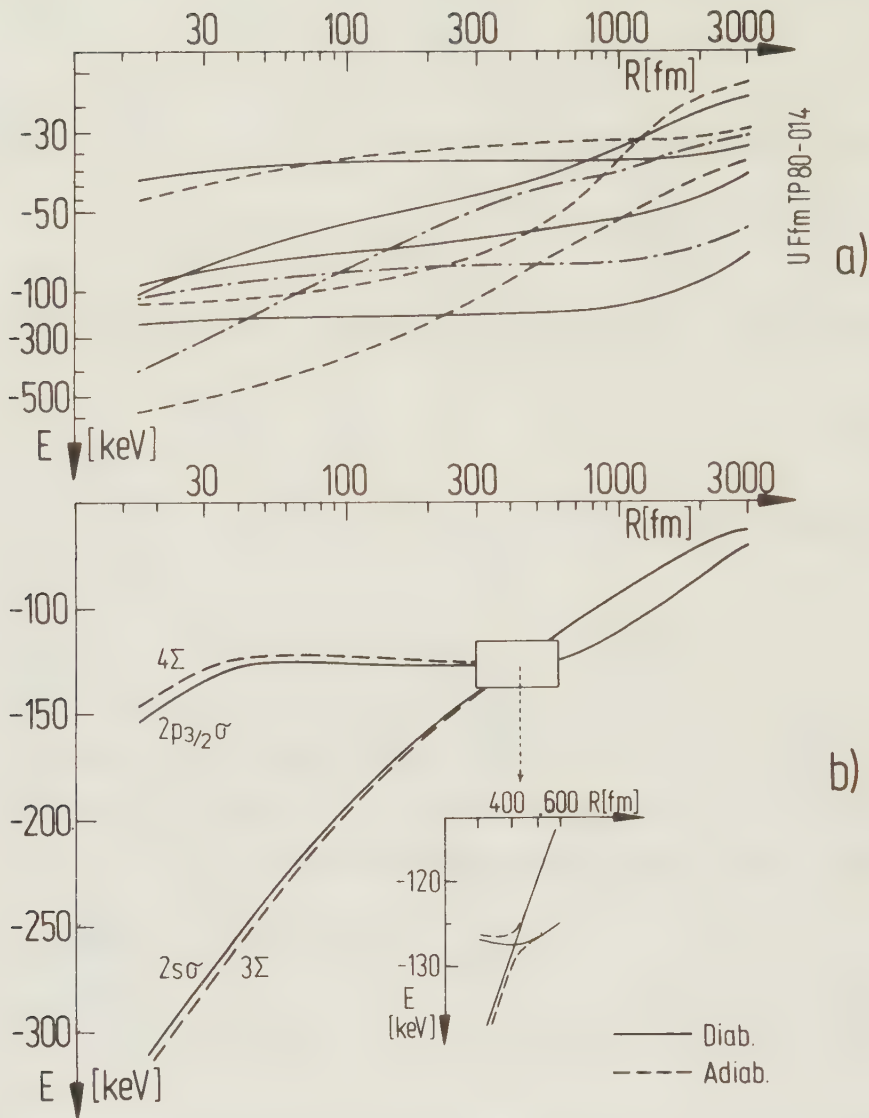
zu bestimmen ist. Schließlich folgt:

$$c_{nj} = S_{nj} \cos G - E_{nj} \sin G \quad (5.16)$$

mit dem vollständig antisymmetrischen Tensor 2. Stufe E_{nj} . Die diabatische Basis erhält man also durch eine Drehung der adiabatischen um den Winkel G , gegeben durch das Integral über das Kopplungsmatrixelement:

$$\begin{pmatrix} \varphi_1^d(R) \\ \varphi_2^d(R) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos G(R) & -\sin G(R) \\ \sin G(R) & \cos G(R) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_1^a(R) \\ \varphi_2^a(R) \end{pmatrix} \quad (5.17)$$

Figur 17.a zeigt ein diabatisiertes Korrelationsdiagramm, daß asymptotisch bis ca. 1500 fm mit dem adiabatischen übereinstimmt. Da keine ∂_R - Kopplungen, also auch keine Kopplungen zwischen s - artigen Zuständen existieren, ist klar, daß alle Niveaus im quasimolekularen Bereich von den ursprünglichen abweichen. Der "1s_g" - Zustand, der in der Asymptotik ($R \rightarrow \infty$) mit dem 1 Σ - Zustand identisch ist, taucht z.B. nicht mehr ein, sondern besitzt innerhalb von 700 fm konstante Bindungsenergie (ca. 260 KeV). Für den Vergleich mit der Monopolnäherung wäre es allerdings interessant, nur die Kopplungen zwischen s- und p- ähnlichen Zuständen wegzutransformieren. Figur 17.b stellt am Bei-



Figur 17:

- (a) Diabatisiertes Pb + Cm - Korrelationsdiagramm der untersten 9 Σ - Zustände. Die unterschiedliche Kennzeichnung der Linien soll helfen, den Verlauf der Niveaus, die sich nun alle kreuzen dürfen, leichter zu verfolgen.
- (b) Diabatisiertes System der Zustände 3Σ und 4Σ . Zusätzlich sind die adiabatischen Niveaus (gestrichelt) eingezeichnet, die asymptotisch ($R \rightarrow \infty$) mit den diabatischen übereinstimmen. Das Inset stellt den Kreuzungsbereich (bei ca. 420 fm) vergrößert dar.

spiel des 2 - Zustandssystems (3Σ , 4Σ) dar, welchen Einfluß der Kopplungspeak (siehe Fig. 13) auf die Zustände hat. Die diabatischen Niveaus kreuzen sich (Inset von Fig. 17.b) und weichen im Innenbereich nur geringfügig von den adiabatischen ab.

Da die Transformation C von der Dynamik unabhängig ist, ist der Zweizentrenabstand R wie auch für die adiabatische Basis der einzige Parameter von $\{\varphi_n^d\}$. $\{\varphi_n^a\}$ und $\{\varphi_n^d\}$ kann man als Grenzfälle "unendlich langsamer" und "unendlich schneller" Stoßprozesse auffassen. Das zweite gilt, weil für hohe Einschubgeschwindigkeiten v_{∞}

$$e^{i \int_{-T}^t dt' \Delta\omega} \approx e^{i \int_{-R_{\max}/v_{\infty}}^{t \pm R_{\max}/v_{\infty}} dt' \Delta\omega} \xrightarrow{v_{\infty} \rightarrow \infty} 1 \quad (5.18)$$

ist, wobei $R_{\max}$ den Wechselwirkungsbereich charakterisiert. Ohne die Kopplung an das Vektorpotential der Kernströme ist das Differentialgleichungssystem (3.19)

$$\dot{b}_{kn} = - \sum_m b_{km} e^{i \int_{-T}^t dt' (\omega_n - \omega_m)} \langle \varphi_n^a | \partial_t | \varphi_m^a \rangle \quad (5.19)$$

wegen (5.18) mit den Bestimmungsgleichungen (5.6) identisch. Das bedeutet, daß jeder endliche Stoß durch Zustände beschrieben wird, die zwischen beiden Extremfällen liegen.

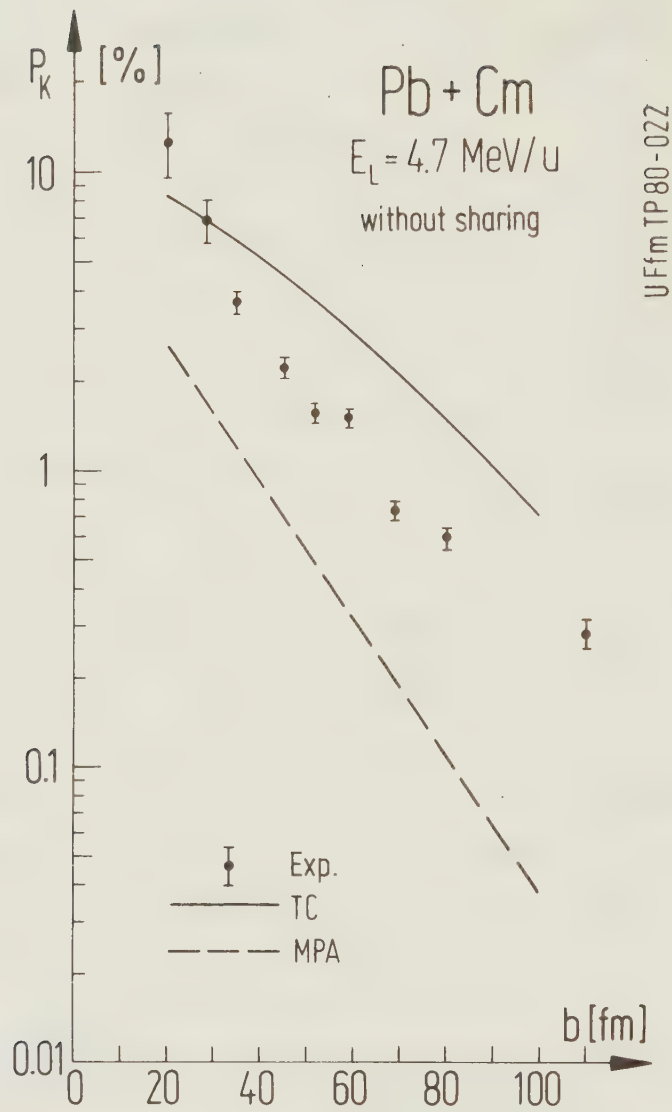
5.3 Numerische Resultate

Unter dem Gesichtspunkt, die Monopolnäherung zu testen, ist die Basis die am besten geeignete, die der Monopolbasis am ähnlichsten ist, und die gleichzeitig dem Zweizentrencharakter des Coulomb-Potentials voll Rechnung trägt. Ideal wäre eine Basis, für die die s - ähnlichen Zustände nicht mehr mit den übrigen koppeln. Ein solches System s - artiger Orbitale könnte durch teilweises Diabatisieren der adiabatischen Basis, also durch Wegtransformieren nur einiger Kopplungen, erzeugt werden. Dieses Verfahren ist aber nicht praktikabel, da die adiabatischen Zustände ihren Drehimpuls-

charakter häufig ändern und kein Zustand (mit Ausnahme des 1Σ) über den gesamten quasimolekularen Bereich als s-artig bezeichnet werden kann. So ist z.B. das 3Σ -Orbital innerhalb von 400 fm dem 2s - Monopolzustand, ab 400 fm aber eher einer p - Welle ähnlich.

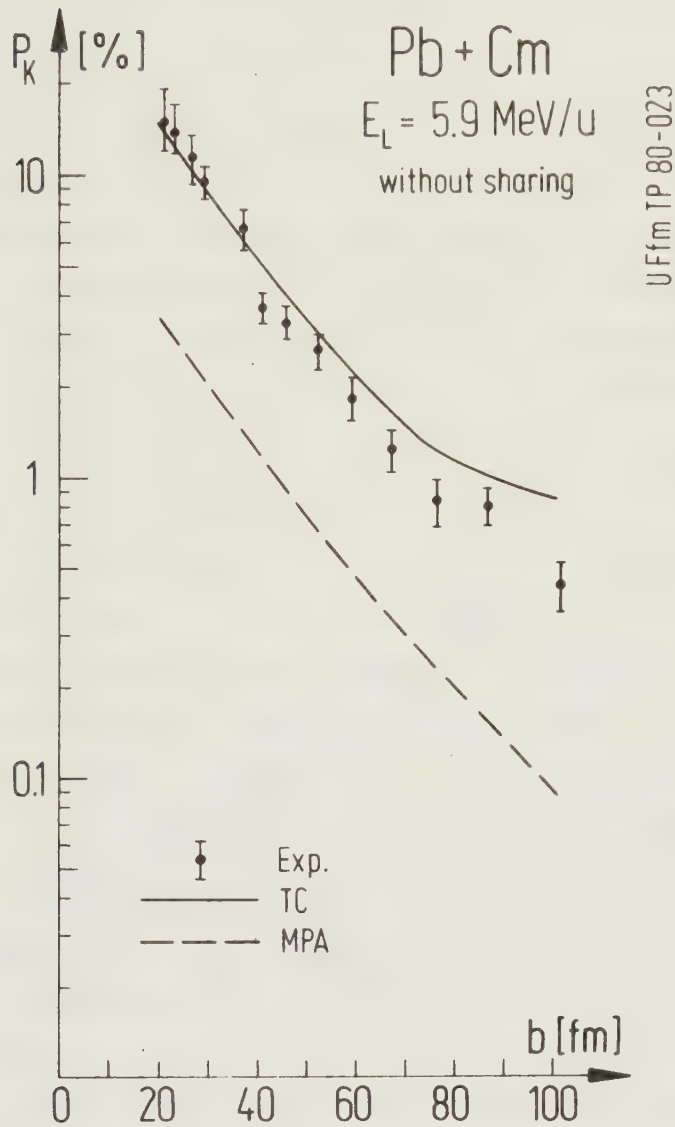
Wir entscheiden uns nun für die adiabatische Zweizentrenbasis und vergleichen sie mit dem System der drei untersten s - Monopolfunktionen. Dazu muß der Zustandsraum so groß gewählt sein, daß für jeden internuklearen Abstand auch die drei untersten Orbitale mit s - Charakter enthalten sind. Aus Figur 14 kann man erkennen, daß der dritte s - artige Zustand im Asymptotischen weitgehend mit dem 9Σ - Orbital, innerhalb von ca. 400 fm aber mit dem 6Σ - Orbital identisch ist. Wenn wir die Basis also auf 11Σ - Niveaus beschränken, werden die drei s - Zustände und alle anderen, die stark an sie koppeln, berücksichtigt. Die beiden obersten, 10Σ und 11Σ , koppeln ihrerseits stark an höhere Σ - Niveaus (Bereich I) ohne jedoch dadurch die K - Ionisation nennenswert zu beeinflussen. Ebenso brauchen die Π - Zustände wegen ihrer schwachen Kopplung an die K - Schale nicht berücksichtigt zu werden: In unseren Rechnungen entfiel auf die 4 untersten Π - Niveaus ein Beitrag zur K - Locherzeugung von weniger als 0.3%. Es zeigte sich sogar (in unserem Modell!), daß die Corioliswechselwirkung insgesamt für die K - Ionisation ohne Bedeutung ist.

In den Figuren 18, 19, 20 werden unsere Resultate, berechnet nach (5.19) und (3.22), mit den vorliegenden experimentellen Daten für verschiedene Einschußenergien (3.6, 4.7 5.9 MeV/u) verglichen. Wir betrachten zunächst die Monopolrechnungen für das oben vorgegebene Zustandssystem $1s, 2s, 3s$ (gestrichelte Kurven). Natürlich kann durch ein derart beschränktes Modell nicht die absolute Größe der Ionisation richtig bestimmt werden - ganz abgesehen davon, daß Effekte wie z.B. Abschirmung noch nicht miteinbezogen wurden. Wichtiger ist vielmehr die Stoßparameterabhängigkeit: Wenn wir die Monopolkurven in den mittleren Stoßparameter-



Figur 19:

Die Einschußenergie wurde gegenüber der vorigen Figur geändert: $E_L = 4.7 \text{ MeV/u}$. Die übrigen Parameter sind identisch.



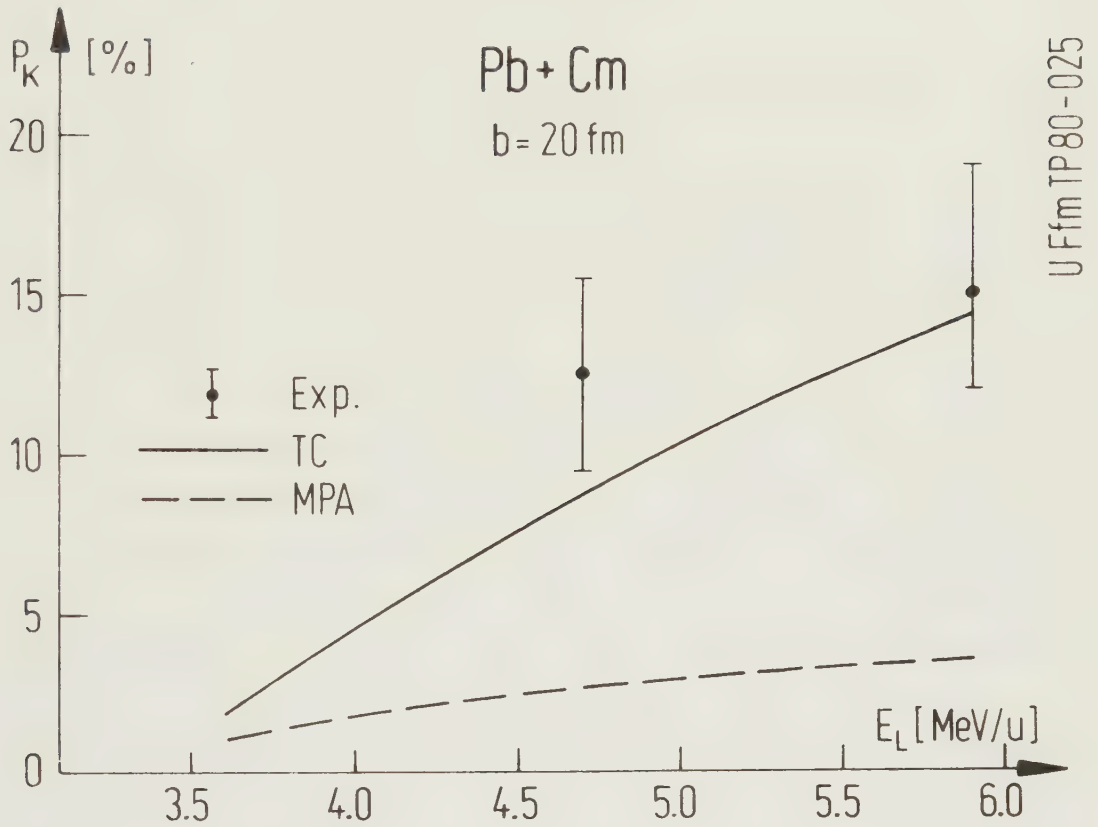
Figur 20:

Vergleiche Figur 18, 19; E_L beträgt nun 5.9 MeV/u. Mit zunehmender Einschüßenergie stimmen die Zweizentrenwerte in der Steigung besser mit den Monopolwerten überein.

bereichen, wo die Steigung gut mit dem Experiment übereinstimmt, im Absolutwert anpassen würden, würde sich für kleine b eine Überhöhung der experimentellen gegenüber den theoretischen Werten zeigen und zwar zunehmend mit abnehmender Einschußenergie. Daran ändert sich auch nichts, wenn man anstatt mit 3 mit ca. 30 s - Zuständen rechnet. Wegen dieser Tendenz ist zu vermuten, daß die Niveaus auch außerhalb eines kleinen Bereiches um den Umkehrpunkt der Trajektorie wechselwirken, was von der Monopolnäherung nicht erfaßt wird. Tatsächlich liegen bei den exakten Zweizentrenzuständen noch große Kopplungen jenseits von 300 fm vor, wo der Dipolanteil des Zweizentrenpotentials eine wichtige Rolle spielt. Insbesondere kommt den Maxima der Matrixelemente in der Nähe verbotener Kreuzungen eine entscheidende Bedeutung für die Anregungsprozesse zu. Die Diskussion im letzten Abschnitt hatte gezeigt, daß die Elektronenwellenfunktionen um so mehr ihren Charakter (insbesondere in Bezug auf den Drehimpuls) beibehalten, je schneller der Stoß verläuft. Daher ist es nicht verwunderlich, daß sich die höheren Multipolmomente des Zweizentrenpotentials bei kleineren Einschußenergien deutlicher bemerkbar machen. Dies wird durch die Zweizentrenrechnung (mit 11Σ - und 4Π - Zuständen) bestätigt. Je höher die Einschußenergie, desto besser ist die Übereinstimmung zwischen den exakten und den Monopol - Kurven bezüglich ihrer Steilheit. Alles andere aber befriedigt nicht: Weder die Einschußenergie - noch die Stoßparameterabhängigkeit sind mit dem Experiment verträglich. Wir bemerken noch, daß zur Vermeidung von vacancy sharing alle Kopplungen zwischen 1Σ ($\hat{=} 1s \epsilon$) und 2Σ ($\hat{=} 2p_{1/2} \epsilon$) abgeschaltet wurden.

Figur 21 stellt die K - Ionisation als Funktion der Einschußenergie für $b = 20$ fm dar. Der steilere Anstieg der Zweizentrenwerte (durchgezogen) bei höherer Energie gegenüber den Monopolwerten (gestrichelt) widerspricht dem oben erwähnten, beobachteten Trend, der daher auch in unserem Zweizentrenmodell nicht verstanden werden kann.

Welche Modellannahmen sind nun als Ursache für diese Diskrepanz in Betracht zu ziehen? Von den zahlreichen Nä-



Figur 21:

Die Einschüßenergieabhängigkeit der K - Locherzeugung des Pb + Cm - Systems für einen Stoßparameter $b = 20 \text{ fm}$. Die Zweizentrenwerte (TC) steigen steiler an als die Monopolwerte (MPA), die eher den experimentellen Verlauf (vom Absolutbetrag abgesehen) wiedergeben.

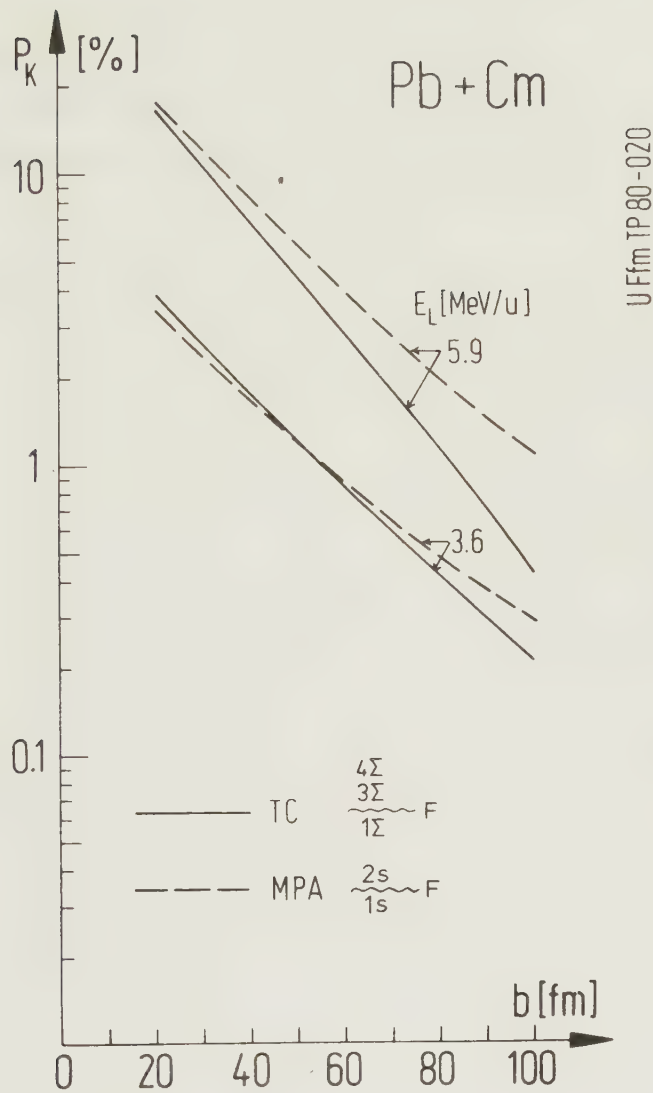
herungen scheinen besonders drei, die wir im Folgenden diskutieren werden, als mögliche Fehlerquellen in Frage zu kommen: die Beschränkung der Basis, die Berechnung der Kopplungsmatrixelemente und die Behandlung der Asymptotik.

5.4 Diskussion der Fehlerquellen

(a)

Um den Einfluß der Beschränkung des Hilbertraumes zu untersuchen, wäre die Basis gegenüber dem bisherigen $(11\sum / 4\pi)$ - Modell erheblich zu erweitern. Das stößt jedoch auf zwei Schwierigkeiten: Zum einen kann das Kontinuum nicht miteinbezogen werden, da derzeit die Kontinuumslösungen der Zweizentren - Dirac - Gleichung noch unbekannt sind. Zum anderen ist es häufig wegen der vielen Pseudokreuzungen und der großen Niveaudichte nicht mehr möglich, höhere, gebundene Eigenzustände zu identifizieren. Man könnte natürlich für die oberen Zustände (einschließlich Kontinuum) Monopollösungen verwenden, die durch ein Orthogonalisierungsverfahren in das System der vorhandenen Zweizentrenbasisfunktionen einzugliedern wären. Ein solcher Ausweg dürfte allerdings als Test der Monopolrechnungen ungeeignet sein. Wir schlagen daher einen anderen Weg ein, indem wir die Basis weiter reduzieren. Sollten sich dann die Differenzen zwischen Monopol- und Zweizentrenrechnungen weiter verstärken, so wäre dies zumindest ein Hinweis, daß das $(11\sum / 4\pi)$ - System zur Beschreibung der Ionisation nicht ausreicht. Wir stellen also dem Monopolmodell mit den Zuständen $1s$ und $2s$ ein Zweizentrenmodell gegenüber, bestehend aus dem $1\sum -$, $3\sum -$ und $4\sum -$ Orbital, so daß beide s - ähnlichen Zustände und alle, die stark an sie koppeln, enthalten sind.

Figur. 22 zeigt das Ergebnis dieser Rechnungen, wobei die gleiche Bezeichnung wie in den Figuren 18, 20 verwendet wurde. Im Vergleich zu den vorigen Rechnungen (Fig. 18 - 20) nehmen die Unterschiede zwischen beiden Modellen ab: Die Zweizentrenwerte stimmen sogar bei kleinen Stoßparametern fast mit den Monopolwerten überein. Das Verhalten, daß für



Figur 22:

Die K - Locherzeugungsrate im $(1\Sigma, 3\Sigma, 4\Sigma)$ - System (TC) und im $(1s, 2s)$ - System (MPA) bei zwei Projektilenergien (durchgezogen 3.6 MeV/u, gestrichelt 5.9 MeV/u). Die Fermi-kante liegt direkt über dem 1Σ - bzw. $1s$ - Zustand.

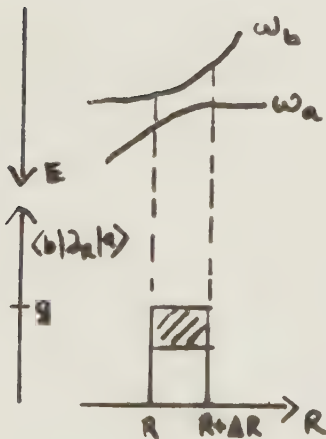
Rechnungen mit mehr Zuständen die Resultate beider Modelle stärker voneinander abweichen, könnte eventuell dadurch erklärt werden, daß mit der Zahl der Zustände auch die Zahl der verbotenen Kreuzungen wächst. Die Fehlerquellen, die damit verbunden sind, werden unter Punkt (b) diskutiert. Zunächst stellen wir fest, daß die Beschränkung des Zustandsraumes als primäre Fehlerursache ausscheidet.

(b)

Aus praktischen Erwägungen ist es im allgemeinen nicht möglich, den gesamten Verlauf der Matrixelemente zu erfassen. Insbesondere in Kreuzungsbereichen kann zur vollständigen Bestimmung ihrer Struktur eine Berechnung in Abständen von wenigen Fermi notwendig werden, was einen enormen numerischen Aufwand darstellt.

Wir untersuchen nun an einem einfachen Modell den Einfluß der Kopplungsstärke auf die Ionisation. Zwei Zustände

$|a\rangle, |b\rangle$ werden durch ein Matrixelement mit der skizzierten Struktur gekoppelt. Die Übergangsamplitude $b_{|a\rangle \rightarrow |b\rangle}$ ist in 1. Ordnung Störungstheorie gegeben durch:



$$b_{|a\rangle \rightarrow |b\rangle}^{(t(R+\Delta R))} = \int_{t(R)}^{t(R+\Delta R)} dt \dot{R} \langle b | \dot{H}_R | a \rangle e^{i \int_{t(R)}^t dt' \Delta \omega}$$

$$\approx g \Delta R \frac{1}{\Delta t} \int_{t(R)}^{t(R+\Delta R)} dt e^{i \int_{t(R)}^t dt' \Delta \omega}$$

Die Anregung von $|a\rangle$ nach $|b\rangle$ im Kopplungsbereich ist daher proportional zum Quadrat der Fläche $G = g \Delta R$ (siehe auch Gl. (5.15)). Bei ungenauer Vorgabe der Kopplungsmatrixelemente entspricht der Fehler in der Lochrate daher dem Quadrat der Abweichung von G (in der Skizze gegeben durch das Verhältnis von schraffierter zur Gesamtfläche G). Auf

Grund der sorgfältigen Zweizentrenrechnungen von W. Betz⁴⁰, auf denen unsere Resultate beruhen, dürfte dieser Fehler vermutlich keine wesentliche Rolle spielen.

(c)

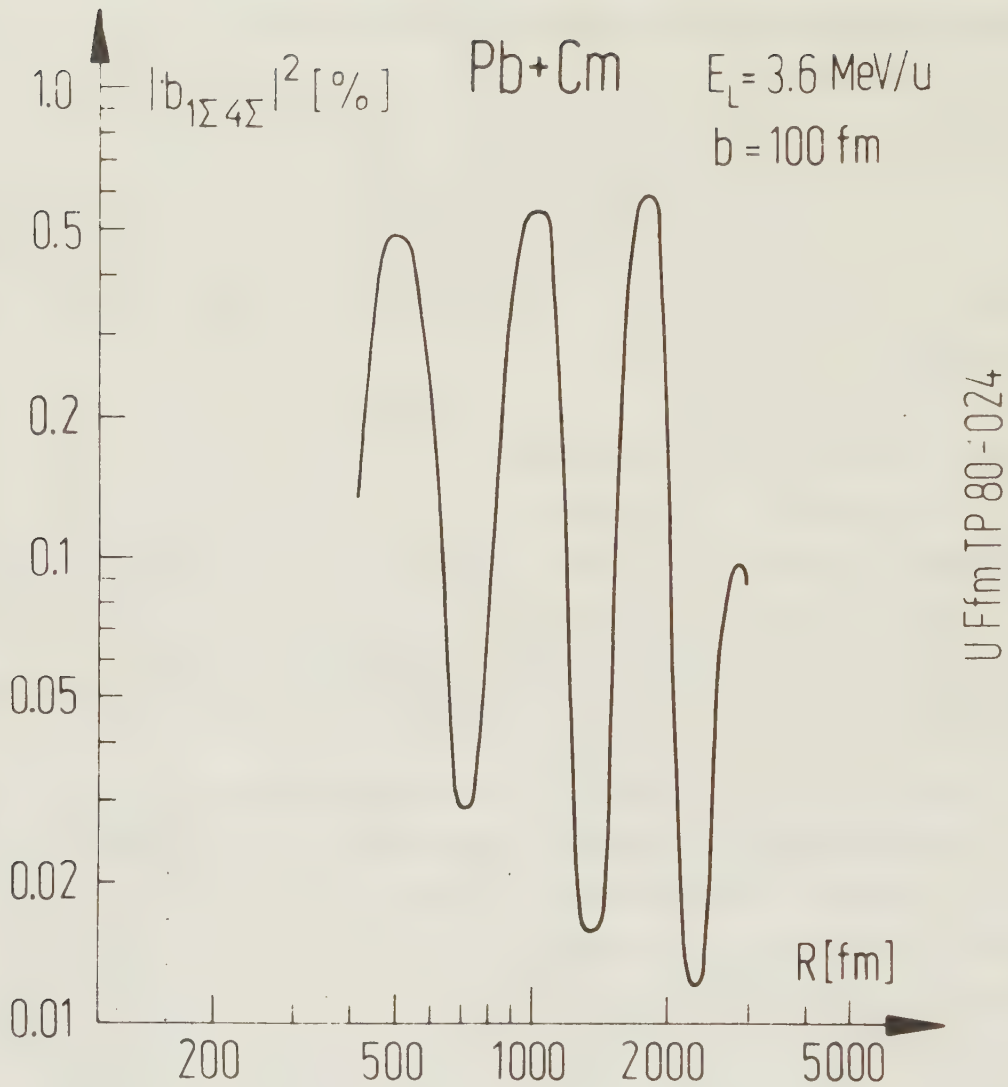
Um der Translation der Elektronen Rechnung zu tragen, hatten wir die ∂_R - Matrixelemente modifiziert (siehe Kap. 2), indem wir die asymptotischen Kopplungen durch einen exponentiellen Faktor dämpften, d.h. für ein vorgegebenes R_0 (hier 1500 fm) wurde

$$\langle \partial_R \rangle \rightarrow \langle \partial_R \rangle e^{-\left(\frac{R-R_0}{\rho}\right)^2}, \quad R > R_0 \quad (5.20)$$

ersetzt. Es zeigt sich nun, daß die Lochamplituden empfindlich insbesondere von der Breite ρ (i.a. 750 fm) abhängen. Dies gilt auch schon für Monopolrechnungen, wo man aber nachweisen kann, daß mit zunehmender Zustandszahl der Einfluß von ρ und R_0 abnimmt.

Wichtiger noch als das Abschneideverfahren ist für die K - Ionisation der Integrationsbereich, festgelegt durch $R_{\max}$: Figur 23 stellt das Betragsquadrat der Übergangsamplitude $b_{11\pi \rightarrow 14\pi}$ im schon besprochenen ($1\Sigma, 3\Sigma, 4\Sigma$) - System dar. Da aus dem Endwert die Locherzeugung berechnet wird, kann man ermessen, welche Bedeutung der Wahl von $R_{\max}$ zukommt: Offensichtlich oszilliert $|b|^2$ trotz Abschneidens der Kopplung im Bereich von 3000 fm noch viel zu stark, um auf den Endwert schließen zu können. Es sei bemerkt, daß die korrekte Behandlung der Translation diese Oszillationen weit weniger dämpft als das hier verwendete Verfahren⁴⁸.

Zusammenfassend können wir also sagen, daß zwischen Monopolrechnungen und exakten Zweizentrenrechnungen in asymmetrischen Systemen große Differenzen auftreten, deren Ursache allerdings zum Teil in zu groben Näherungen zu suchen ist. Umfangreichere Rechnungen werden zeigen, inwieweit echte Abweichungen bestehen, die man ausschließlich dem Einfluß der höheren Multipolmomente zuordnen kann.



Figur 23:

Das Betragsquadrat der Übergangsamplitude $b_{1\Sigma \rightarrow 4\Sigma}$ als Funktion des Zweizentrenabstandes R auf dem auslaufenden Ast der Hyperbel. Bei 3000 fm sind die Oszillationen noch zu stark, um auf den Endwert der Ionisation schließen zu können.

6. Die Pb + Pb - Röntgenstrahlung

Den in den Kapiteln 3 und 4 vorgestellten Formalismus wenden wir jetzt zur Berechnung der MO - Strahlung an. Wir werden wieder das Pb + Pb - System diskutieren, um auch zu sehen, inwieweit sich die neuen Resultate von den früheren (Kap. 2) unterscheiden. Zunächst aber untersuchen wir eine Näherung, von der wir schon im Abschnitt (2.2) Gebrauch gemacht haben: die Annahme langer Wellenlängen.

6.1 Der Grenzfall langer Wellenlängen

Große rechentechnische Vereinfachung bringt der Grenzfall langer Wellenlängen mit sich, den wir im Folgenden mit der Abkürzung LWLL (long wave length limit) bezeichnen. Gerechtfertigt ist die Substitution (2.21), wenn

$$|\vec{k} \cdot \vec{r}| = \omega r \ll 1 \quad (2.21a)$$

gilt. Die nachfolgende Tabelle zeigt einige Werte des Produktes ωr für den uns interessierenden Photonenenergiebereich $200 \text{ KeV} \leq \omega \leq 1400 \text{ KeV}$, wobei für r die Radien verschiedener Orbitale bei einem Zweizentrenabstand von 500 fm angenommen wurden⁵⁰.

$\omega [\text{KeV}]$	1sG	2sG	2p _{1/2} G	2p _{3/2} π
200	0.6	1.8	1.0	1.4
600	1.7	5.5	3.0	4.3
1000	2.9	9.1	5.1	7.1
1400	3.9	12.8	7.1	9.9

Trotz der großen Werte für ωr werden wir die Strahlungsmatrixelemente (4.23) im LWLL nähern, beschränken uns aber auf die Berechnung der K - MO - Strahlung, da diese, wie aus der

Tabelle hervorgeht, Bedingung (2.21a) am schwächsten verletzt.

Wir leiten nun aus den allgemeinen Formeln (4.1a-e) das Spektrum und die Anisotropie im LWLL ab. Der Vorteil dieser Näherung liegt darin, daß sich der Strahlungsoperator als Skalarprodukt des Polarisations- und des Dipolvektors darstellen läßt:

$$-ie \vec{\epsilon}_\lambda^* (\omega_e - \omega_{e'}) \langle \psi_e | \vec{r} | \psi_{e'} \rangle =: -ie \vec{\epsilon}_\lambda^* \cdot \vec{d}_{ee'} \quad (6.1)$$

wobei $\vec{d}_{ee'}$ von den Photonenwinkeln unabhängig ist. Da außer ϑ_N alle Winkel ($\varphi_N, \vartheta_K, \varphi_K$) zeitlich konstant sind, ist es nützlich, den Dipol in das System der Streuebene zu transformieren und zu definieren (siehe dazu Gl. (4.6) für $\varphi_N = 0$ und Fig. 12):

$$T_1^{nm} \equiv \int dt e^{i\omega t} \sum_{ee'} b_{ne}^{(+)*} b_{me'}^{(+)} e^{i\int dt' (\omega_e - \omega_{e'})} (d_{ee'}^{S_2})_1 \quad (6.2)$$

$$T_2^{nm} \equiv \int dt e^{i\omega t} \sum_{ee'} b_{ne}^{(+)*} b_{me'}^{(+)} e^{i\int dt' (\omega_e - \omega_{e'})} [(d_{ee'}^{S_2})_2 \cos \vartheta_N + (d_{ee'}^{S_2})_3 \sin \vartheta_N]$$

$$T_3^{nm} \equiv \int dt e^{i\omega t} \sum_{ee'} b_{ne}^{(+)*} b_{me'}^{(+)} e^{i\int dt' (\omega_e - \omega_{e'})} [-(d_{ee'}^{S_2})_2 \sin \vartheta_N + (d_{ee'}^{S_2})_3 \cos \vartheta_N]$$

Ferner setzen wir

$$T_i \equiv \sum_n T_i^{nm} \quad (6.3)$$

Mit diesen Abkürzungen wird $I(\vec{k}, \lambda)$ dann beschrieben durch

$$I(\vec{k}, \lambda) = \frac{e^2}{2\omega} \left[\left| \vec{\epsilon}_\lambda^* \cdot \begin{pmatrix} T_1 \sin \varphi_N + T_2 \cos \varphi_N \\ -T_1 \cos \varphi_N + T_2 \sin \varphi_N \\ T_3 \end{pmatrix}^{S_1} \right|^2 + \right. \\ \left. + \sum_{\substack{n>F \\ m<F}} \left| \vec{\epsilon}_\lambda^* \cdot \begin{pmatrix} T_1^{nm} \sin \varphi_N + T_2^{nm} \cos \varphi_N \\ -T_1^{nm} \cos \varphi_N + T_2^{nm} \sin \varphi_N \\ T_3^{nm} \end{pmatrix}^{S_1} \right|^2 \right] \quad (6.4)$$

Wir können nun die Integration über φ_N , die Summation über λ und die Mittelung über φ_K (siehe (4.1c)) analytisch durchführen. Als erstes untersuchen wir die φ_N - Integration und erhalten nach Ausmultiplikation des Skalarproduktes und des Betragsquadrates in (6.4) unter Berücksichtigung von

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \sin \varphi = \int_0^{2\pi} d\varphi \cos \varphi = \int_0^{2\pi} d\varphi \sin \varphi \cos \varphi = 0$$

und

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \sin^2 \varphi = \int_0^{2\pi} d\varphi \cos^2 \varphi = \pi$$

die Beziehung

$$\begin{aligned} & \int_0^{2\pi} d\varphi_N I(\vec{k}, \lambda) = \\ &= \frac{e^2}{2\omega} \pi \left[(|\varepsilon_{\lambda 1}^{S_1}|^2 + |\varepsilon_{\lambda 2}^{S_1}|^2) (|T_1|^2 + |T_2|^2) + 2|\varepsilon_{\lambda 3}^{S_1}|^2 |T_3|^2 + \right. \\ &+ (\varepsilon_{\lambda 1}^{S_1} \varepsilon_{\lambda 2}^{S_1*} - \varepsilon_{\lambda 1}^{S_1*} \varepsilon_{\lambda 2}^{S_1}) T_1^* T_2 + (\varepsilon_{\lambda 1}^{S_1*} \varepsilon_{\lambda 2}^{S_1} - \varepsilon_{\lambda 1}^{S_1} \varepsilon_{\lambda 2}^{S_1*}) T_1 T_2^* + \\ &+ \sum_{\substack{n>F \\ m<F}} \left\{ (|\varepsilon_{\lambda 1}^{S_1}|^2 + |\varepsilon_{\lambda 2}^{S_1}|^2) (|T_1^{nm}|^2 + |T_2^{nm}|^2) + 2|\varepsilon_{\lambda 3}^{S_1}|^2 |T_3^{nm}|^2 + \right. \\ &+ (\varepsilon_{\lambda 1}^{S_1} \varepsilon_{\lambda 2}^{S_1*} - \varepsilon_{\lambda 1}^{S_1*} \varepsilon_{\lambda 2}^{S_1}) T_1^{nm*} T_2^{nm} + (\varepsilon_{\lambda 1}^{S_1*} \varepsilon_{\lambda 2}^{S_1} - \varepsilon_{\lambda 1}^{S_1} \varepsilon_{\lambda 2}^{S_1*}) T_1^{nm} T_2^{nm*} \left. \right\} \end{aligned} \quad (6.5)$$

Beim Summieren über λ beachten wir, daß

$$\vec{\varepsilon}_{\lambda}^{S_3*} = - \vec{\varepsilon}_{-\lambda}^{S_3}, \quad \lambda = \pm 1$$

(siehe (4.10)) und damit auch

$$\vec{\varepsilon}_{\lambda}^{S_1*} = - \vec{\varepsilon}_{-\lambda}^{S_1}$$

gilt, weshalb die Mischterme in (6.5)

$$\sum_{\lambda=\pm 1} (\varepsilon_{\lambda 1}^{S_1*} \varepsilon_{\lambda 2}^{S_1} - \varepsilon_{\lambda 1}^{S_1} \varepsilon_{\lambda 2}^{S_1*})$$

verschwinden. Ferner ist wegen (4.5), (4.10) und (4.11)

$$\begin{aligned} \sum_{\lambda=\pm 1} (|\varepsilon_{\lambda 1}^{S_1}|^2 + |\varepsilon_{\lambda 2}^{S_1}|^2) &= 2(|\varepsilon_{\lambda 1}^{S_1}|^2 + |\varepsilon_{\lambda 2}^{S_1}|^2) \\ &= \cos^2 \vartheta_K + 1 \\ &= 2 - \sin^2 \vartheta_K \end{aligned}$$

und

$$\sum_{\lambda=\pm 1} |\varepsilon_{\lambda 3}^{S_1}|^2 = \sin^2 \vartheta_K$$

ϑ_K tritt jetzt nicht mehr in den Formeln auf, so daß die Mittelung über ϑ_K trivial ist. Zusammengefaßt gilt also:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi_K \int_0^{2\pi} d\varphi_N \sum_{\lambda=\pm 1} I(\vec{k}, \lambda) &= \\ &= \frac{e^2}{\omega} \pi \left[|\Pi_1|^2 + |\Pi_2|^2 + \frac{1}{2} \sin^2 \vartheta_K (-|\Pi_1|^2 - |\Pi_2|^2 + 2|\Pi_3|^2) + \right. \\ &\quad \left. + \sum_{\substack{n>F \\ m<F}} (|\Pi_1^{nm}|^2 + |\Pi_2^{nm}|^2 + \frac{1}{2} \sin^2 \vartheta_K (-|\Pi_1^{nm}|^2 - |\Pi_2^{nm}|^2 + 2|\Pi_3^{nm}|^2)) \right] \end{aligned} \quad (6.6)$$

Das Spektrum (4.1d) erhalten wir nach Integration über den Photonenraumwinkel Ω_K und über den Stoßparameter:

$$\frac{d\sigma}{d\omega} = \frac{e^2 \omega}{3\pi} \int_0^\infty b db \sum_{i=1}^3 (|\tilde{\sum}_n T_i^{nm}|^2 + \sum_{\substack{n>F \\ m<F}} |T_i^{nm}|^2) \quad (6.7)$$

wobei

$$\int \Omega_K d\Omega_K \sin^2 \vartheta_K = \frac{8\pi}{3}$$

und (4.27) benutzt wurde. Zur Berechnung der Anisotropie setzen wir (6.6) in (4.1e) ein, woraus folgt:

$$\eta = \frac{\int_0^\infty b db \left[|\tilde{\sum}_n T_3^{nm}|^2 + \sum_{\substack{n>F \\ m<F}} |T_3^{nm}|^2 \right]}{\int_0^\infty b db \sum_{i=1}^3 \left[|\tilde{\sum}_n T_i^{nm}|^2 + \sum_{\substack{n>F \\ m<F}} |T_i^{nm}|^2 \right]} - \frac{1}{2} \quad (6.8)$$

Es sei noch erwähnt, daß es i.a. günstiger ist, die sphärischen Komponenten von $\vec{d}_{ee'}$ zu verwenden (z.B. in Gl. (6.2)):

$$d_{ee'}^{\nu} = \begin{cases} \mp \frac{1}{\sqrt{2}} ((d_{ee'})_1 \pm i(d_{ee'})_2) & : \nu = \pm 1 \\ (d_{ee'})_3 & ; \nu = 0 \end{cases}$$

d.h.

(6.9 a, b)

$$\vec{d}_{ee'} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} (d_{ee'}^1 - d_{ee'}^{-1}) \\ \frac{i}{\sqrt{2}} (d_{ee'}^1 + d_{ee'}^{-1}) \\ d_{ee'}^0 \end{pmatrix}$$

Dadurch können nämlich alle auftretenden Strahlungsmatrixelemente mit Hilfe der üblichen Drehimpulsalgebra sphärischer Tensoren³⁹ berechnet werden.

6.2 Zur Behandlung der Zeitintegrale

Wie im Abschnitt (2.2) zerlegen wir die in (6.2) auftretende Zeitintegration in 3 Teile:

$$\int_{-\infty}^{\infty} = \int_{-\infty}^{-T} + \int_{-T}^T + \int_T^{\infty}$$

Im Unterschied zu vorher ist das erste Integral der rechten Seite nun nicht mehr null, da die Anfangsbedingungen anders formuliert sind. Früher war $a_{1s}(t) = 0$ für $t \leq -T$, jetzt soll nach (3.20) gelten:

$$b_{ne}^{(+)}(t) = \delta_{ne} \quad ; \quad t \leq -T$$

Ferner nehmen wir an, daß

- (i) $\omega_e(t) = \omega_e^0 \quad ; \quad |t| \geq T$
- (ii) $b_{ne}^{(+)}(t) = b_{ne}^{(+)}(T) \quad ; \quad t \geq T$
- (iii) $\vec{D}_{ee'}(t) = \begin{cases} \vec{D}_{ee'}(-T) & ; \quad t \leq -T \\ \vec{D}_{ee'}(T) & ; \quad t \geq T \end{cases}$

gilt, wobei $\vec{D}$ den ins Streusystem transformierten Dipolvektor (6.1) bezeichnet:

$$\vec{D}_{ee'} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \vartheta_n & \sin \vartheta_n \\ 0 & -\sin \vartheta_n & \cos \vartheta_n \end{pmatrix} \vec{d}_{ee}$$

Wir können daher schreiben

$$\begin{aligned} \vec{T}^{nm} = & \vec{D}_{nm}(-T) \int_{-\infty}^{-T} dt e^{i(\omega_n^0 - \omega_m^0)(t+T) + i\omega t} + \\ & + \int_{-T}^T dt e^{i\omega t} \sum_{e,e'} b_{ne}^{(+)*} b_{me'}^{(+)} e^{i \int_{-T}^t dt' (\omega_e - \omega_{e'})} \vec{D}_{ee'} + \\ & + \sum_{e,e'} b_{ne}^{(+)*}(T) b_{me'}^{(+)}(T) \vec{D}_{ee'}(T) e^{i \int_{-T}^T dt (\omega_e - \omega_{e'})} \int_T^{\infty} dt e^{i(\omega_e^0 - \omega_{e'}^0)(t-T) + i\omega t} \end{aligned}$$

Zur Lösung der Integrale im ersten und dritten Summand verwenden wir die Fourierdarstellung der Sprungfunktion

$$\Theta(x) = \lim_{\eta \rightarrow 0} i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\Omega}{2\pi} \frac{e^{-i\Omega x}}{\Omega + i\eta} = \begin{cases} 1 & ; \quad x > 0 \\ 0 & ; \quad x < 0 \end{cases}$$

Es folgt

$$\begin{aligned}
 \int_{-\infty}^{-T} dt e^{i(\omega_n^0 - \omega_m^0 + \omega)t} &= \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(\omega_n^0 - \omega_m^0 + \omega)t} \Theta(-t-T) = \\
 &= \lim_{\eta \rightarrow 0} i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\Omega}{2\pi} \frac{1}{\Omega + i\eta} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(\omega_n^0 - \omega_m^0 + \omega)t + i\Omega(t+T)} = \\
 &= \lim_{\eta \rightarrow 0} i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\Omega}{2\pi} \frac{e^{i\Omega T}}{\Omega + i\eta} 2\pi \delta(\omega_n^0 - \omega_m^0 + \omega + \Omega) = \\
 &= -i \frac{e^{-i(\omega_n^0 - \omega_m^0 + \omega)T}}{\omega_n^0 - \omega_m^0 + \omega}
 \end{aligned}$$

Entsprechend gilt

$$\int_T^{\infty} dt e^{i(\omega_l^0 - \omega_{l'}^0 + \omega)t} = i \frac{e^{i(\omega_l^0 - \omega_{l'}^0 + \omega)T}}{\omega_l^0 - \omega_{l'}^0 + \omega}$$

Fassen wir alles zusammen, so erhalten wir schließlich

$$\begin{aligned}
 \vec{T}^{nm} &= -i \frac{\vec{D}_{nm}(-T)}{\omega_n^0 - \omega_m^0 + \omega} e^{-i\omega T} + \\
 &+ \int_{-T}^T dt e^{i\omega t} \sum_{l, l'} b_{ne}^{(+)*} b_{me'}^{(+)} e^{i \int_{-T}^t dt' (\omega_l - \omega_{l'})} \vec{D}_{le'} + \\
 &+ i \sum_{l, l'} b_{ne}^{(+)*}(T) b_{me'}^{(+)}(T) \frac{\vec{D}_{le'}(T)}{\omega_l^0 - \omega_{l'}^0 + \omega} e^{i \int_{-T}^T dt (\omega_l - \omega_{l'}) + i\omega T}
 \end{aligned}$$

6.3 Strahlungsspektrum und Anisotropie des Pb + Pb - Systems

Die im letzten Kapitel eingeführte adiabatische Notation ist für Pb + Pb - Rechnungen weniger vorteilhaft als die ursprüngliche ($1s\epsilon$, $2s\epsilon$, $2p_{1/2}\epsilon$,), da Pseudokreuzungen allgemein in symmetrischen Systemen wesentlich seltener und in unserem Modell durch die Beschränkung der Basis und des Wechselwirkungsbereiches sogar überhaupt nicht auftreten (siehe Fig. 3.a). Ein weiterer Vorteil symmetrischer Systeme ist, daß die Intensität (4.2) im LWLL einfach gegeben ist durch

$$I(\vec{k}, \lambda) = \sum_{\substack{n>F \\ m<F}} |H_{\vec{k}\lambda}^{nm}|^2 \quad (6.10)$$

Der zweite Term in (4.2), $|\sum_n H_{\vec{k}\lambda}^{nn}|^2$, verschwindet identisch, insbesondere ist

$$H_{\vec{k}\lambda}^{nn} = -\frac{e}{(2\omega)^{1/2}} \int dt e^{i\omega t} \vec{\epsilon} \cdot \langle \Psi_n | \vec{r} | \Psi_n \rangle = 0 \quad (6.11)$$

weil der Strahlungsoperator $\vec{r}$ die Parität ändert, die Ψ_n 's aber Zustände zu guter Parität sind. Aus diesem Grund gilt (6.11) auch noch in der Dipolnäherung. Es folgt für das Spektrum und die Anisotropie:

$$\frac{d\epsilon}{d\omega} = \frac{e^2 \omega}{3\pi} \int_0^\infty b db \sum_{i=1}^3 \sum_{\substack{n>F \\ m<F}} |T_i^{nm}|^2$$

und

$$\eta(\omega) = \frac{\int_0^\infty b db \sum_{\substack{n>F \\ m<F}} |T_3^{nm}|^2}{\int_0^\infty b db \sum_{\substack{n>F \\ m<F}} (|T_1^{nm}|^2 + |T_2^{nm}|^2)} - \frac{1}{2} \quad (6.12)$$

wobei $\vec{T}$ der in (6.2) definierte Vektor ist.

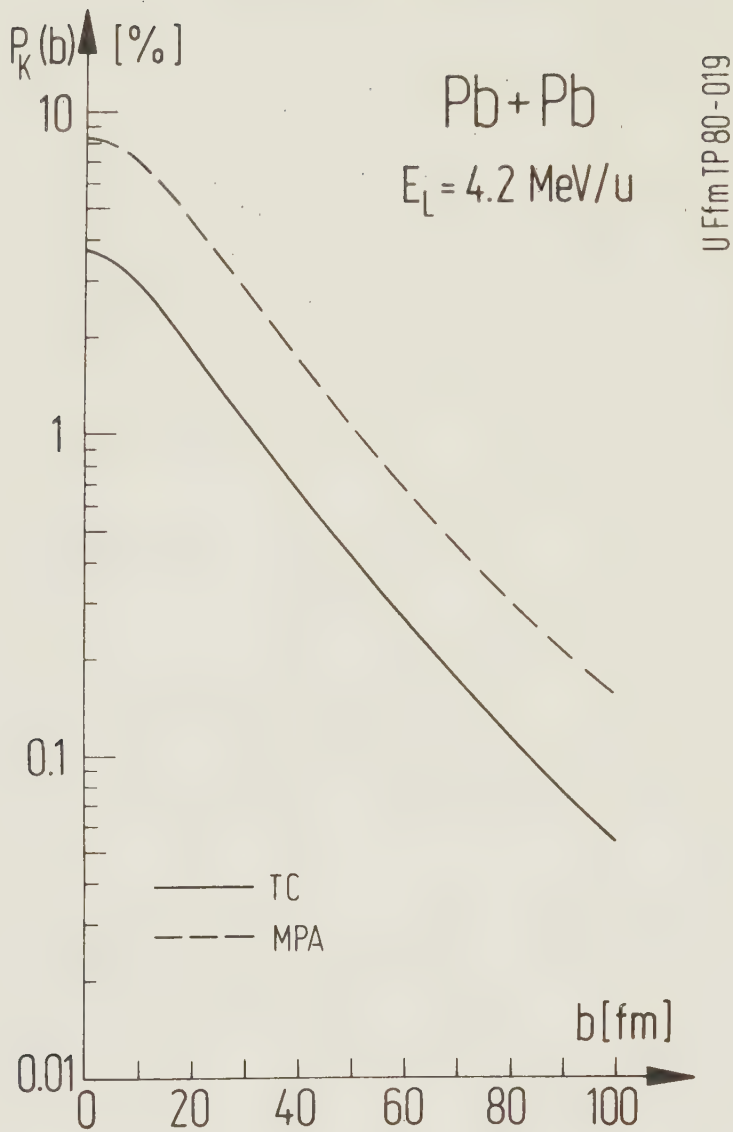
Wir beschränken nun den Zustandsraum und betrachten das in Abschnitt (2.3) vorgestellte KLM - Modell, bestehend aus den besetzten K - und L - und den leeren M - Orbitalen (bei $t = -\infty$). Derartige Modelle liefern zunächst keine quan-

titativen Aussagen. Diese erhält man aber, indem man die K - Ionisation des KLM - Modells mit den entsprechenden Werten aus der Monopolrechnung vergleicht, die höhere s - Zustände (bis einschließlich 8s) und das Kontinuum einbezieht. Figur 24 zeigt, daß beide Kurven (gestrichelt: Monopol-, durchgezogen: Zweizentrenrechnungen) nahezu parallel verlaufen. Wir haben daher alle folgenden Strahlungsquerschnitte mit einem Faktor 2.5 multipliziert, um die Ionisation auch quantitativ ausreichend zu erfassen. Ein solches Verfahren setzt allerdings voraus, daß die Zweizentreneffekte in gleicher Weise skalieren.

In Figur 25 sind die K - Spektren (MO) zu zwei Einschußenergien (4.2 und 5.8 MeV/u) im Vergleich zur Kern - Kern Bremsstrahlung (NNB)⁴⁹ dargestellt. Das Eintauchen in den NNB - Untergrund geschieht sicherlich weit jenseits der K_{α} - Linie am Umkehrpunkt der Trajektorie (Pfeile).

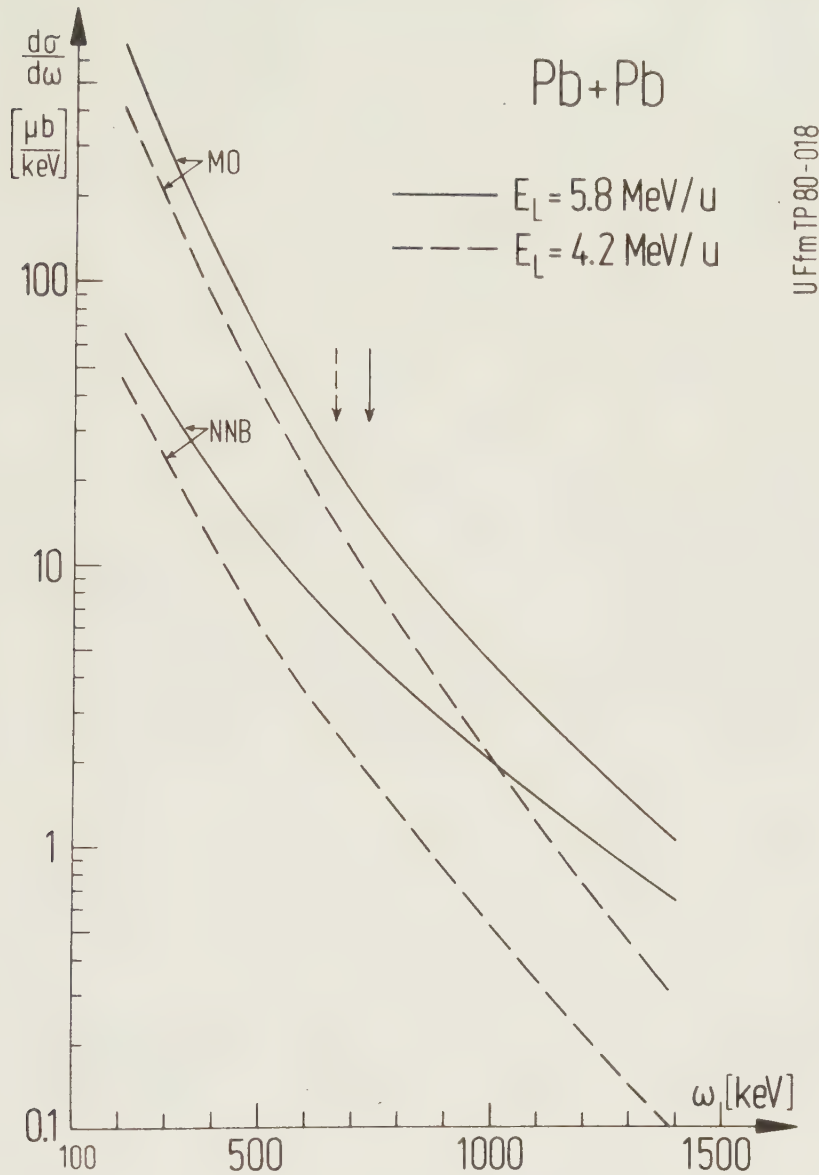
Wird die Fermikante unterhalb des $2p_{3/2}\pi$ - Zustandes gewählt, so nimmt der Wirkungsquerschnitt etwa um einen Faktor 1.8 ab in Übereinstimmung mit dem früheren Resultat (Fig. 7), daß der $2p_{3/2}\pi \rightarrow 1s\sigma$ Übergang den Hauptbeitrag liefert.

Wie die nächste Figur (Fig. 26) zeigt, unterscheidet sich das neue 4.2 MeV/u - Spektrum (durchgezogene Kurve) von dem nach der in Kapitel 2 beschriebenen Methode berechneten Spektrum (gestrichelt) durch einen wesentlich flacheren Verlauf, der sich auch experimentell andeutet (siehe Fig. 10). Wir wollen daher noch einmal die wichtigsten Unterschiede erwähnen: Erstens wurde die Ionisation nun mit exakten Zweizentrenzuständen, also nicht in der Monopolnäherung, berechnet, zweitens wurden die p - Niveaus in die Dynamik miteinbezogen - im Gegensatz zu früher, wo wir sie als während des ganzen Stoßes konstant besetzt annahmen. Den Einfluß der Rotationskopplung, die ja auch in den ersten Rechnungen vernachlässigt wurde, zeigt die dritte (strichpunktierte) Kurve von Fig. 26: Zumindest bei hohen Photonenenergien kann ein wesentlicher Teil der Differenz zwischen altem und neuem Modell auf die Corioliswechselwirkung zurückgeführt werden.



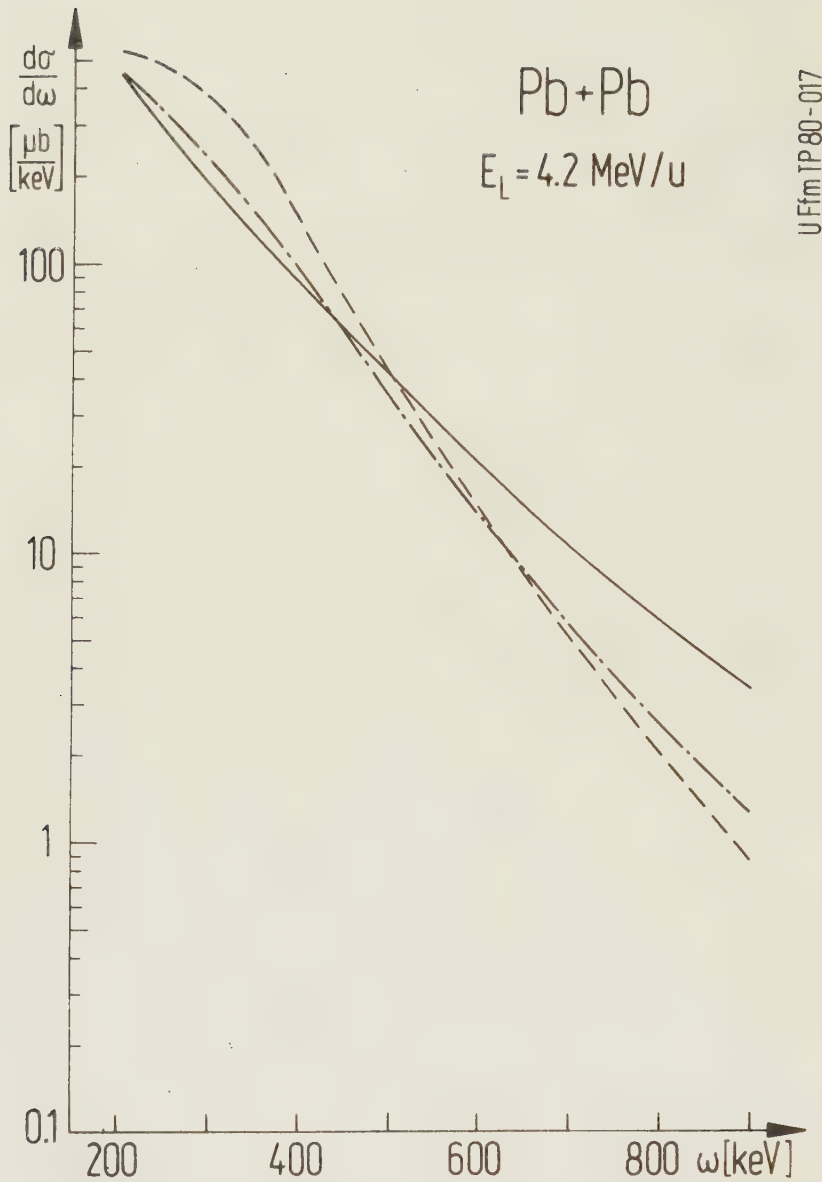
Figur 24:

Vergleich der K - Ionisation des Pb + Pb - Systems zwischen den Werten des KLM - Modells (TC), das Zweizentrenorbitale verwendet, und der Monopolnherung (MPA) mit 8 gebundenen und 20 Kontinuums - s - Zustnden.



Figur 25:

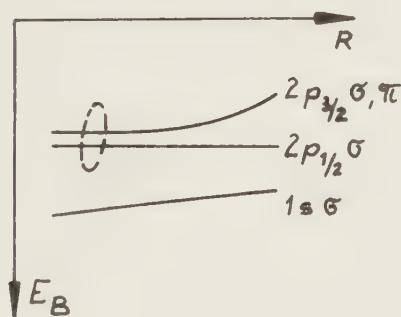
Die K - MO - Spektren (MO) des Pb + Pb - Systems, berechnet nach der neuen Strahlungsformel (Gl. (3.41)) bei zwei Einschußenergien (gestrichelt 4.2 MeV/u, durchgezogen 5.8 MeV/u) im Vergleich zur Kern - Kern - Bremsstrahlung (NNB). Die K_{α} - Linien des vereinigten System sind durch Pfeile markiert.



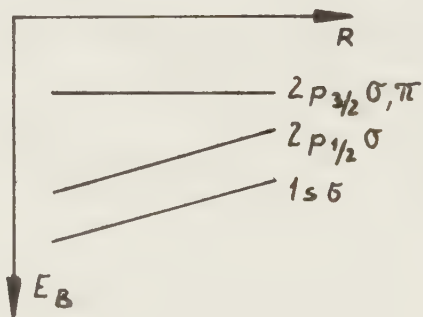
Figur 26:

Vergleich des neuen 4.2 MeV/u - Pb + Pb - Spektrums, berechnet mit (durchgezogen) und ohne (strichpunktiert) Rotationskopplung, mit den alten Modellrechnungen (gestrichelt). Für höhere Photonenenergien ($\omega > 500 \text{ KeV}$) scheint der Einfluß der Rotationskopplung wesentlich zu sein.

Das Verhalten der Anisotropie η bei Variation verschiedener Parameter wird in Figur 27.a,b,c dargestellt: 27.a vergleicht η bei zwei Einschüßenergien (4.2 und 5.8 MeV/u), 27.b untersucht die Lage der Fermikante, wobei der $2p_{3/2}\pi$ - Zustand einmal unterhalb und einmal oberhalb gewählt wurde, und in 27.c wurde η mit und ohne Rotationskopplung berechnet. Durchgezogen ist dabei immer die 4.2 MeV/u - Kurve des KLM - Modells. In allen Fällen ist der Trend derselbe: Die zunächst schwach negative Anisotropie ($|\eta| < 10\%$) wächst mit zunehmender Photonenenergie bis in einen Sättigungsbe- reich (etwa ab 1000 KeV), wo sie zwischen 40% und 50% (ohne Rotationskopplung: 30% - 40%) beträgt. Wir stellen also fest, daß die Fermi - Kante keine Rolle spielt, ein Align- ment daher bedeutungslos ist. Das gleiche gilt für die Ro- tationskopplung, d.h., es tritt auch kein slippage (Fig. 11) auf. Letzteres war zu erwarten, da in hochrelativistischen Systemen nur Zustände mit gleichen "Quantenzahlen" n , l und j nennenswert durch die Rotation gekoppelt werden.

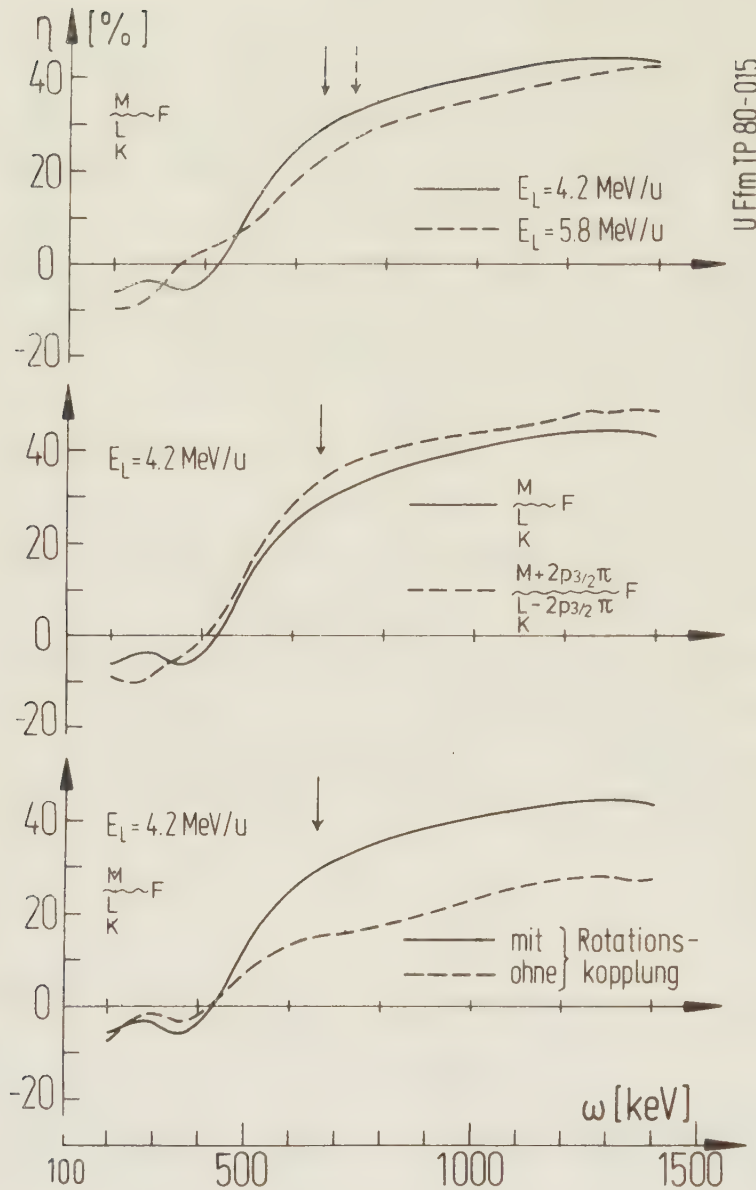


a) nichtrelativistisch



b) relativistisch

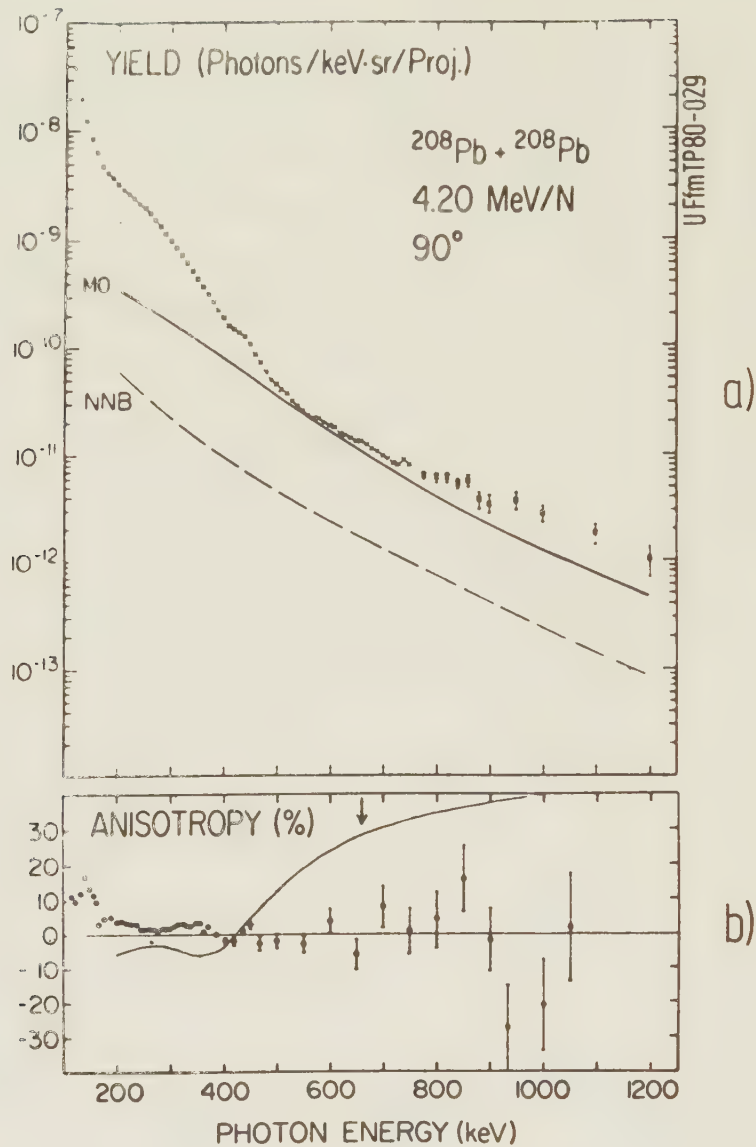
Die Skizze zeigt die Feinstrukturaufspaltung zwischen den Niveaus $2p_{3/2}\sigma, \pi$ und $2p_{1/2}\sigma$ für leichte (a) und für schwere Systeme (b). Da zwei Zustände um so schwächer kop- peln, je größer ihr Energieabstand ist, ist die obige Aus- sage evident.



Figur 27:

Die Anisotropie η als Funktion der Photonenenergie (a) bei zwei Einschüßenergien (4.2 MeV/u und 5.8 MeV/u), (b) bei zwei Fermikanten und (c) berechnet mit und ohne Rotationskopplung. Die durchgezogene Kurve stellt immer die Anisotropie für $E_L = 4.2$ MeV/u dar, wobei die Rotationskopplung berücksichtigt und die Fermi - Kante über die L - Schale gelegt wurde. Die Pfeile kennzeichnen die K_α - Energie im vereinigten System.

Schließlich vergleichen wir wieder unsere Resultate mit den experimentellen Daten von W. Wölfli, W.E. Meyerhof und Mitarbeitern (Fig. 28.a,b). Der exponentielle Abfall des Spektrums (27.a) stimmt nun auch für hohe Photonenenergien bis auf eine kleine Abweichung recht gut überein (vgl. Fig. 10). Weit ungünstiger dagegen fällt der Vergleich zwischen berechneter und gemessener Anisotropie aus (28.b). Das ursprünglich erwartete Maximum bei der K_{α} - Linie des vereinigten Systems (Pfeil) wird allerdings auch experimentell nicht gefunden. Ursache der Diskrepanz könnte zum einen die Behandlung der K - Ionisation sein, die die Strahlung entscheidend beeinflusst. Alle Näherungen, die im vorigen Kapitel bei der Berechnung der Locherzeugung des Pb + Cm - Systems diskutiert wurden, kommen auch hier als Fehlerquellen in Betracht. Zum anderen sei noch einmal auf den LWLL als besonders kritischer Annahme vor allem im Hochenergiebereich hingewiesen (siehe Tabelle in Abschnitt 6.1).



Figur 28:

Gegenüberstellung der theoretischen und experimentellen Daten.

- (a) Das nach der Strahlungsformel (3.41) berechnete MO - Spektrum stimmt im Hochenergiebereich wesentlich besser mit dem gemessenen überein als das aus den alten Rechnungen extrapolierte (Fig. 10).
- (b) Die beobachtete Anisotropie kann im Rahmen unserer Näherungen (Grenzfall langer Wellenlängen etc.) nicht erklärt werden.

7. Zusammenfassung und Ausblick

In der vorliegenden Arbeit wurden elektronische Anregungs- und Strahlungsprozesse im Schwerionenstoß diskutiert, wobei drei fundamentale Voraussetzungen zugrunde gelegt wurden: die semiklassische Näherung, die Adiabasie und die Vernachlässigung der Elektron - Elektron - Wechselwirkung. Ausgangspunkt der Betrachtung war das Eintauchen der K - Schale in das untere Kontinuum und seine Konsequenzen bzw. Nachweismöglichkeiten. Von diesen wählten wir die K - Ionisation und die K - MO - Röntgenstrahlung aus, die wir bezüglich ihrer Stoßparameter- und Einschußenergieabhängigkeit untersuchten. Die Strahlungsquerschnitte wurden natürlich auch als Funktion der Photonenenergie betrachtet.

Wir begannen mit der MO - Strahlung des Pb + Pb - Systems und verwendeten zu ihrer Beschreibung Konfigurationen. Da das System der gekoppelten Kanalgleichungen nur durch Vereinfachung gelöst werden konnte, mußte der Vielteilchenzustandsraum geeignet reduziert werden. Zwei der notwendigen Annahmen erlaubten aber nicht mehr, die Anisotropie der Röntgenstrahlung zu berechnen: die während des Stoßes konstante Besetzung der p - ähnlichen Molekülorbitale und die Vernachlässigung der Rotationskopplung.

Der feldtheoretische Ansatz führt nicht zu diesem Mangel, da nun alle Prozesse im Einteilchenbild beschrieben werden können. Die p - Niveaus und die Rotationskopplung lassen sich ohne Schwierigkeiten in das Differentialgleichungssystem der gekoppelten Einteilchenamplituden einbeziehen. Ein weiterer Vorteil dieser Formulierung besteht darin, daß im Gegensatz zur Vielteilchen - S - Matrix - Theorie auch Teilchenerzeugungs- und Vernichtungsprozesse erfaßt werden.

Mit Hilfe des neuen Formalismus wurde wiederum das K - MO - Spektrum des Pb + Pb - Systems berechnet. Während bei den früheren Ergebnissen das theoretische gegenüber dem gemessenen Spektrum zu steil abfiel, zeigen die neuen Resultate eine gute Übereinstimmung mit dem Experiment. Diese Verbesserung kann im wesentlichen der Rotationskopplung zu-

geschrieben werden. Dagegen konnte die Anisotropie nicht befriedigend erklärt werden. Ursache dafür ist vermutlich der Grenzfall langer Wellenlängen, der zwar den numerischen Aufwand erheblich verringert, der aber den physikalischen Gegebenheiten widerspricht. Für das Verständnis der Anisotropie ist es daher unerlässlich, auf diese Näherung zu verzichten.

Eine andere experimentelle Methode, den Zerfall des neutralen Vakuums nachzuweisen, ist die Messung der K - Locherzeugungsrate P_K asymmetrischer Systeme. Aus theoretischer Sicht ist zu testen, wie sensitiv P_K auf eine Variation der MO - Energien reagiert. Man kann auch von einem analytischen Zusammenhang zwischen P_K und der Bindungsenergie der K - Schale ausgehen, der aber nur in der Monopolnäherung gilt. Unsere Rechnungen für das Pb + Cm - System, die den Zweizentrencharakter des Coulomb - Potentials berücksichtigen, führten zu großen Abweichungen sowohl vom Monopolmodell als auch vom Experiment. Wir vermuten als Ursache für diese Unterschiede die Behandlung der asymptotischen Kopplungen zwischen den quasistationären Zuständen. Ähnlich wie im Fall der Anisotropie können auch hier nur sehr viel aufwendigere Rechnungen Aufschluß geben. Da die damit verbundenen Schwierigkeiten numerischer und keineswegs prinzipieller Natur sind, sind wir von der Möglichkeit überzeugt, die QED starker Felder im Schwerionenstoß testen zu können.

Anhang

Wir leiten jetzt die Strahlungsformel (3.41) im Vielteilchen-S - Matrix - Formalismus, den wir in Abschnitt 2.1 vorstellten, ab und geben nur die wichtigsten Schritte an.

Die Intensität im Konfigurationsformalismus ist nach (2.15) gegeben durch das Quadrat der Strahlungsamplitude (2.13), summiert über alle (End-) Kanäle:

$$\begin{aligned} I(\vec{k}, \lambda) &= \sum_f |c_{\vec{k}\lambda}^{fi}|^2 \\ &= \int dt dt' \sum_f \langle \chi_i^{(+)}(t') | \vec{j} \cdot \vec{q}_{\vec{k}\lambda} | \chi_f^{(-)}(t') \rangle \langle \chi_f^{(-)}(t) | \vec{j} \cdot \vec{q}_{\vec{k}\lambda}^* | \chi_i^{(+)}(t) \rangle \end{aligned} \quad (A1)$$

Der entscheidende Schritt des Beweises besteht darin, die $(-)$ - Lösungen durch die $(+)$ - Lösungen zu ersetzen. Diese Substitution wird durch die Unitarität des Zeitentwicklungsoperators (2.11) gerechtfertigt. Es gilt also

$$\begin{aligned} \sum_f | \chi_f^{(-)}(t') \rangle \langle \chi_f^{(-)}(t) | &= \\ &= U(t', \infty) \sum_f |f\rangle \langle f| U^\dagger(t, \infty) \\ &= U(t', t) \\ &= U(t', -\infty) \sum_f |f\rangle \langle f| U^\dagger(t, -\infty) \\ &= \sum_f | \chi_f^{(+)}(t') \rangle \langle \chi_f^{(+)}(t) | \end{aligned} \quad (A2)$$

Die eindeutige Zuordnung zwischen $|f\rangle$, definiert in (2.8), und $|\chi_f\rangle$, (2.7), ist bei einer adiabatischen Wechselwirkung möglich und entspricht dem adiabatischen Ein- und Ausschalten der Quelle des elektromagnetischen Feldes (siehe Gl. (3.8)). Daher ist

$$I(\vec{k}, \lambda) = \sum_f |\tilde{c}_{\vec{k}\lambda}^{fi}|^2 \quad (A3)$$

mit

$$\tilde{c}_{k\lambda}^{fi} = -i \int dt e^{i\omega t} \langle \chi_f^{(+)}(t) | \vec{j} \cdot \vec{q}_{k\lambda}^* | \chi_i^{(+)}(t) \rangle \quad (A4)$$

$\tilde{c}_{k\lambda}^{fi}$ selbst hat keine physikalische Interpretation, führt aber zur gleichen Intensität, wenn wir über einen vollständigen Satz von Konfigurationen summieren.

In einem System mit fester Elektronenzahl N kann $\chi^{(+)}$ durch eine Slaterdeterminante von dynamischen Einteilchen - Lösungen $\Psi^{(+)}$ (Gl. (3.18)) dargestellt werden:

$$\chi_e^{(+)} = \frac{1}{(N!)^{1/2}} \begin{vmatrix} \Psi_{e_1}^{(+)}(1) & \dots & \Psi_{e_1}^{(+)}(N) \\ \vdots & & \vdots \\ \Psi_{e_N}^{(+)}(1) & \dots & \Psi_{e_N}^{(+)}(N) \end{vmatrix} \quad (A5)$$

$\Psi_{e_j}^{(+)}(i)$ bezeichnet dabei das i -te Elektron im Zustand j der Konfiguration l . Wir definieren:

$$(F)_{ej} = \langle \Psi_{e_j}^{(+)}(j) | \quad , \quad (I)_{ej} = | \Psi_{e_j}^{(+)}(j) \rangle \quad (A6)$$

Ferner benutzen wir die Notation $A_{(nk)}$ für eine Matrix A , bei der die n -te Zeile und die k -te Spalte eliminiert wurden. Unter Verwendung des Determinanten - Entwicklungssatzes können wir dann für das Strahlungsmatrixelement schreiben:

$$\langle \chi_f^{(+)} | \vec{j} \cdot \vec{q}_{k\lambda}^* | \chi_i^{(+)} \rangle = \frac{1}{N!} \sum_{n,m} (-1)^{n+m} \langle \Psi_{f_n}^{(+)} | \vec{j} \cdot \vec{q}_{k\lambda}^* | \Psi_{i_m}^{(+)} \rangle \sum_{k=1}^N |F_{(nk)}| |I_{(mk)}| \quad (A7)$$

wobei die Multiplikation der beiden Determinanten die Bildung des Skalarproduktes miteinschließt. Dieses Produkt läßt sich vereinfachen, wenn man beachtet, daß eine Permutation von Spalten die Determinante einer Matrix nur im

Vorzeichen ändern kann. Wir erhalten:

$$\sum_k |F_{(nk)}| |I_{(mk)}| = N! |S_{(mn)}^{fi}| \quad (A8)$$

mit

$$(S^{fi})_{ke} = \langle \Psi_{fe}^{(+)} | \Psi_{ik}^{(+)} \rangle = \delta_{fe} \delta_{ik} \quad (A9)$$

An dieser Stelle wird die Bedeutung der Substitution $C_{k\lambda}^{fi} \rightarrow \tilde{C}_{k\lambda}^{fi}$ klar. Bis hierhin hätten wir auch mit der Strahlungsamplitude $C_{k\lambda}^{fi}$ arbeiten können und die analogen Resultate erhalten. Das Matrixelement

$$(S^{fi})_{ke} = \langle \Psi_{fe}^{(-)} | \Psi_{ik}^{(+)} \rangle$$

wäre aber kein Kronecker - Delta mehr.

Für $\tilde{C}_{k\lambda}^{fi}$ folgt nun:

$$\tilde{C}_{k\lambda}^{fi} = -i \sum_{n,m=1}^N (-)^{n+m} |S_{(mn)}^{fi}| H_{k\lambda}^{fnim} \quad (A10)$$

mit

$$H_{k\lambda}^{fnim} = \int dt e^{i\omega t} \langle \Psi_{fn}^{(+)}(t) | \vec{j} \cdot \vec{q}_{k\lambda}^* | \Psi_{im}^{(+)}(t) \rangle \quad (A11)$$

Um Bedingung (A9) auszuwerten, untersuchen wir systematisch alle Endkonfigurationen f , die in 3 Klassen unterteilt werden können:

- (a) Im ersten Fall ist f identisch mit i , der Anfangskonfiguration. Es gilt dann:

$$|S_{(mn)}^{ii}| = \delta_{mn}$$

und damit

$$\tilde{C}_{k\lambda}^{ii} = -i \sum_{m \in i} H_{k\lambda}^{mm} \quad (A12)$$

- (b) Die nächste Klasse umfaßt alle Konfigurationen $f^{(1)}$, die sich durch ein angeregtes Elektron von i unterscheiden. $|S_{(mn)}^{f^{(1)}i}|$ ist nur für ein Paar (m,n) ungleich null, so daß bis auf ein Vorzeichen gilt:

$$\tilde{C}_{\vec{k}\lambda}^{f^{(1)}i} \sim i H_{\vec{k}\lambda}^{nm}, \quad n \neq i, \quad m \in i \quad (A13)$$

- (c) Weil der Rang von S^{fi} gegeben ist durch

$$\text{rk } S^{fi} = N - N_{ex}$$

wobei N_{ex} die Zahl der angeregten Elektronen ist, verschwindet $|S_{(mn)}^{fi}|$ für alle Konfigurationen mit $N_{ex} \geq 2$ wegen

$$\text{rk } S_{(mn)}^{fi} \leq \text{rk } S^{fi} < N-1$$

Fassen wir diese Resultate zusammen, so erhalten wir für die Intensität:

$$\begin{aligned} I(\vec{k}, \lambda) &= |\tilde{C}_{\vec{k}\lambda}^{ii}|^2 + \sum_{f^{(1)}} |\tilde{C}_{\vec{k}\lambda}^{f^{(1)}i}|^2 \\ &= \sum_{\substack{n \neq i \\ m \in i}} |H_{\vec{k}\lambda}^{nm}|^2 + \left| \sum_{n \in i} H_{\vec{k}\lambda}^{un} \right|^2 \end{aligned} \quad (A14)$$

in Übereinstimmung mit Gleichung (3.41). Der Uhling - Term tritt in (A 14) nicht auf, weil wir von N - Teilchen - Zuständen ausgegangen sind.

Wir weisen noch einmal darauf hin, daß die Ableitung von (A 14) nur durch die Annahme einer festen Elektronenzahl möglich wurde. Im Gegensatz dazu kommt die feldtheoretische

Beschreibung ohne diese Voraussetzung aus, was für die Beschreibung von Vorgängen mit Paarerzeugung wichtig ist.

Literaturverzeichnis

1. B. Müller, J. Rafelski and W. Greiner, Z. Phys. 257, 62 (1972)
2. H. Backe, L. Handschug, F. Hessberger, E. Kankelait, L. Richter, F. Weick, R. Willwater, H. Bokemeyer, P. Vincent, Y. Nakayama and J.S. Greenberg, Phys. Lett. 40, 1443 (1978)
3. C. Kozuharov, P. Kienle, E. Berdermann, H. Bokemeyer, J.S. Greenberg, Y. Nakayama, P. Vincent, H. Backe, L. Handschug and E. Kankelait, Phys. Rev. Lett. 42, 376 (1979)
4. F. Bosch, H. Krimm, B. Martin, B. Povh, T. Walcher and K. Traxel, Phys. Lett. 78b, 568 (1978)
5. D. Liesen, P. Armbruster, H.-H. Behncke, F. Bosch, S. Hagmann, P.H. Mokler, H. Schmidt-Böcking and R. Schuch, Intermediate, Superheavy Atomic Collision Systems - Experiments at the Unilac, preprint, Darmstadt 1979
6. J.S. Greenberg, C.K. Davis and P. Vincent, Phys. Rev. Lett. 33, 473 (1974)
7. G. Kraft, P.H. Mokler and H.J. Stein, Phys. Rev. Lett. 33, 476 (1974)
8. Ch. Stoller, W. Wölfli, G. Bonani, M. Stöckli and M. Suter, J. Phys. B10, L347 (1977)
9. W. Wölfli, E. Morenzoni, Ch. Stoller, G. Bonani and M. Stöckli, Phys. Lett. 68a, 217 (1978)
10. R. Anholt, Z. Phys. A288, 257 (1978)

11. W.E. Meyerhof, T.K. Saylor, S.M. Lazarus, A. Little, B.B. Triplett, L.F. Chase and R. Anholt, Phys. Lett. 32, 1279 (1974)
12. K.H. Heinig, H.U. Jäger, H. Richter, H. Woittenek, W. Frank, P. Gippner, K.H. Kaun and P. Manfrass, J. Phys. B10, 1321 (1977)
13. P. Vincent, C.K. Davis and J.S. Greenberg, Phys. Rev. A18, 1878 (1978)
14. B. Müller and W. Greiner, Phys. Rev. Lett. 33, 469 (1974)
15. Ch. Stoller, W. Wölfli, G. Bonani, E. Morenzoni and M. Stöckli, Z. Phys. A287, 33 (1978)
16. W. Wölfli, Ch. Stoller, G. Bonani, M. Stöckli, M. Suter and W. Däppen, Z. Phys. A286, 249 (1978)
17. J.S. Briggs and J. Macek, J. Phys. B5, 579 (1972)
18. J.S. Briggs, J.H. Macek and K. Taulbjerg, Angular Distributions of MO X - Ray Emission, preprint, Harwell 1978
19. Eine Übersicht aller bekannten Eigenschaften der Anisotropie ist zu finden bei:
W. Wölfli, Molecular X - Rays from Heavy Ion Collisions, Int. Conf. on "Dynamical Properties of Heavy Ion Reactions", Johannesburg, August 1978
20. J.S. Briggs and K. Dettmann, J. Phys. B10, 1113 (1977)
21. E. Merzbacher and H.W. Lewis, Handbuch Physik 34 (1958)
22. J. Rafelski and B. Müller, Phys. Rev. Lett. 36, 517 (1976)

23. W. Däppen and W. Baltensperger,
J. Phys. B10, 1309 (1977)
24. D.R. Bates and R. Mc Carroll,
Proc. Roy. Soc. London, Ser. A245, 175 (1958)
U. Heinz, Dissertation, Frankfurt am Main, 1980
25. G. Soff, J. Reinhardt, W. Betz and J. Rafelski,
Physica Scripta 17, 417 (1978)
26. T.H. Rihan, N.S. Aly, E. Merzbacher, B. Müller
and W. Greiner, Z. Phys. A285, 397 (1978)
27. W. Betz, G. Soff, B. Müller and W. Greiner,
Phys. Rev. Lett. 37, 1046 (1976)
28. G. Soff, W. Greiner, W. Betz and B. Müller,
Phys. Rev. A19, 169 (1979)
29. J. Reinhardt, G. Soff and W. Greiner,
Z. Phys. A276, 285 (1976)
30. J. Reinhardt, V. Oberacker, B. Müller, W. Greiner
and G. Soff, Phys. Lett. 78b, 183 (1978)
31. F. Folkmann, C. Gaarde, T. Huus and K. Kemp,
Nucl. Inst. Meth. 116, 487 (1974)
32. H. Schmidt-Böcking, private Mitteilung
(wird veröffentlicht)
33. W.E. Meyerhof, D.L. Clark, Ch. Stoller, E. Morenzoni,
W. Wölfl, F. Folkmann, P. Vincent, P.H. Mokler and
P. Armbruster, Phys. Lett. 70A, 303 (1979)
34. J. Reinhardt, B. Müller, W. Greiner and G. Soff,
Phys. Rev. Lett, 43, 1307 (1979)
35. J. Schwinger, Phys. Rev. 91, 713 (1953)

36. P. Roman, Introduction to Quantum Field Theory,
New York: John Wiley and Sons, 1969
37. K. Bleuler, Helv. Phys. Acta 23, 567 (1950)
38. S.N. Gupta, Proc. Phys. Soc. A63, 681 (1950)
39. M.E. Rose, Elementary Theory of Angular Momentum,
New York: John Wiley and Sons, 1957
40. W. Betz, Dissertation, Frankfurt am Main, 1980
41. A. de-Shalit and J. Talmi, Nuclear Shell Theory,
New York and London: Academic Press, 1963
42. B. Müller, G. Soff and W. Greiner,
Z. Phys. A285, 27 (1978)
43. D. Liesen, P. Armbruster, F. Bosch, S. Hagmann,
P.H. Mokler, H. Schmidt-Böcking, R. Schuch,
J.B. Wilhelmy and H.J. Wollersheim,
Experimental Confirmation of a Scaling Law for $1s\bar{s}$
Excitation Probability in the Region $Z_1 + Z_2 > 120$
and of its Breakdown in Pb + Cm Collisions at Very
Small Internuclear Distances, preprint, GSI,
Darmstadt, 1979
44. Yu.N. Demkov, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 45, 195 (1963),
W.E. Meyerhof, Phys. Rev. Lett. 22, 1341 (1973)
45. C. Zener, Proc. Roy. Soc. A137, 696 (1932)
L. Landau, Phys. Z. Sowjet 2, 46 (1932)
E.C.G. Stückelberg, Helv. Phys. Acta 5, 369 (1932)
46. Für das Überlassen der Figuren 18, 19, 20 sei Herrn
W. Betz herzlich gedankt.
47. T.G. Heil and A. Dalgarno, J. Phys. B8, L557 (1979)

- 48. U. Heinz, private Mitteilung
- 49. Für das Überlassen von Monopol - Energien und - Matrixelementen sowie von Bremsstrahlungsspektren sei Herrn Dr. J. Reinhardt herzlich gedankt.
- 50. K.H. Wietschorke, Diplomarbeit

Lebenslauf

Am 10. Februar 1952 wurde ich als Sohn von Rudolf Kirsch und seiner Ehefrau Marielotte, geb. von Versen, in Frankfurt am Main geboren. Von 1958 bis 1962 besuchte ich die Grundschule in Frankfurt am Main und ging ab April 1962 auf das Lessing - Gymnasium, an dem ich im Juni 1971 das Abitur ablegte. Seit Oktober 1971 studiere ich an der Johann Wolfgang Goethe-Universität zu Frankfurt am Main Physik und Mathematik. Im Juli 1973 bestand ich die Diplom-Vorprüfung in Mathematik, im Mai 1976 die Diplom - Hauptprüfung in Physik. Seitdem bin ich am Institut für Theoretische Physik als wissenschaftlicher Mitarbeiter tätig.

Meine akademischen Lehrer waren:

Prof.Dr. N. Adasch, Prof.Dr. F. Constantinescu,
Dr. A. Doiwa, Prof.Dr. R. Dreizler, Prof.Dr. T. Elze,
Prof.Dr. L. Gerritzen, Prof.Dr. W. Greiner,
Prof.Dr. H. Hartmann, Prof.Dr. K. Hensen,
Prof.Dr. H. Kerner, Prof.Dr. K.-H. König,
Prof.Dr. W. Martienssen, Prof.Dr. G. Mauck,
Prof.Dr. E. Mohler, Prof.Dr. K.-H. Müller,
Prof.Dr. F. Rauch, Prof.Dr. H. Roesky,
Prof.Dr. E. Schopper, Prof.Dr. C. Toepffer

Meinem Lehrer, Herrn Prof. Dr. Walter Greiner, möchte ich für die Anregung zu dieser Arbeit, seine wertvollen Ratschläge sowie sein kritisches Interesse recht herzlich danken.

Besonderer Dank gebührt auch Herrn Prof. Dr. Berndt Müller für die vielen hilfreichen Diskussionen und Ideen und für die freundliche Betreuung, die wesentlich zur Vollendung dieser Arbeit beitrugen.

Ferner bin ich meinen Kollegen im Institut für Theoretische Physik für die gute Zusammenarbeit und die stete Diskussionsbereitschaft zu großem Dank verpflichtet, insbesondere den Herrn W. Betz, U. Heinz, R. Könnecke, H. Peitz, Dr. J. Reinhardt, M. Riedel, Dr. G. Soff, Dr. M. Soffel und Dr. H. Stöcker.

Frau B. Utschig sei für die sorgfältige Anfertigung der Zeichnungen ebenso wie Frä. G. Roth für das Tippen der Arbeit herzlich gedankt.

Die Rechenzeit wurde von der Gesellschaft für Schwerionenforschung (GSI) zur Verfügung gestellt.

Schließlich möchte ich noch meinen Eltern danken, die mir mein Studium ermöglichten und mit viel Geduld unterstützten.

